

ZWEI BEISPIELE NICHTLINEARER DYNAMIK:
SOLITONEN IN PLANAREN FERROMAGNETEN -
CHAOS IN QUANTENSYSTEMEN

INAUGURAL-DISSERTATION

zur Erlangung des Doktorgrades
der Naturwissenschaftlichen Fakultät

vorgelegt beim Fachbereich Physik
der Johann Wolfgang Goethe-Universität
in Frankfurt am Main

von

Dieter Hackenbracht

Frankfurt am Main 1984



ZWEI BEISPIELE NICHTLINEARER DYNAMIK:
SOLITONEN IN PLANAREN FERROMAGNETEN -
CHAOS IN QUANTENSYSTEMEN

INAUGURAL-DISSERTATION

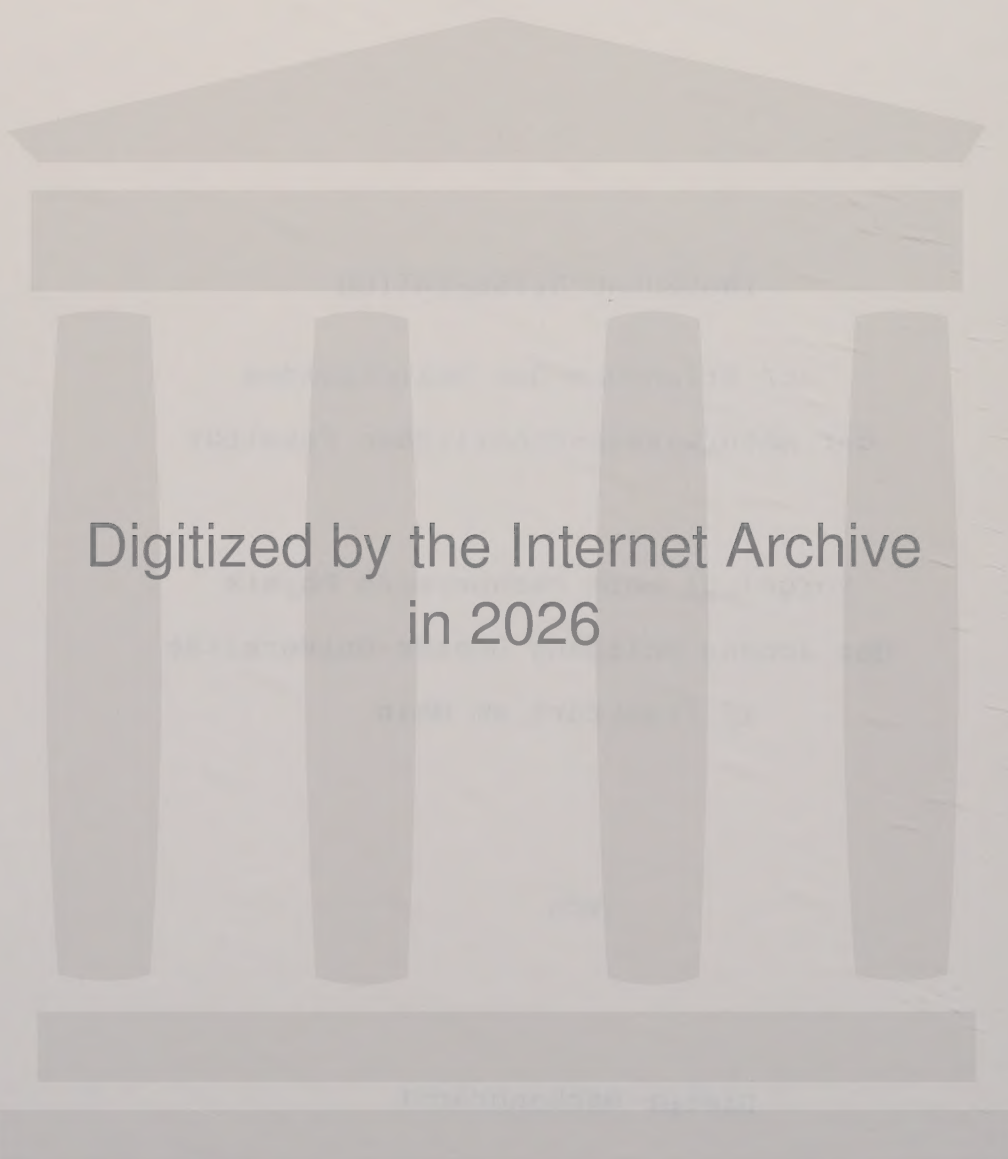
zur Erlangung des Doktorgrades
der Naturwissenschaftlichen Fakultät

vorgelegt beim Fachbereich Physik
der Johann Wolfgang Goethe-Universität
in Frankfurt am Main

von

Dieter Hackenbracht

Frankfurt am Main 1984



Digitized by the Internet Archive
in 2026

https://archive.org/details/IA41550813_0015

Gedruckt mit Genehmigung des Fachbereichs Physik
der Johann Wolfgang Goethe-Universität
Frankfurt am Main

Dekan: Prof. Dr. F. Granzer
1. Berichterstatter: Prof. Dr. H.G. Schuster
2. Berichterstatter: Prof. Dr. R.J. Jelitto
Tag der Promotion: 7.5.1984

INHALTSVERZEICHNIS

	Seite
Zusammenfassung	1
Einleitung	3
 TEIL I : ZUM NACHWEIS VON SOLITONEN IN PLANAREN FERRO- MAGNETEN	 9
1. Erzeugung nichtthermischer Solitonen	9
1.1 Das Modell	9
1.2 Die modifizierte sine-Gordon Gleichung	12
1.3 Lösung des Anfangswertproblems	16
1.3.1 Das direkte Streuproblem für die sine- Gordon Gleichung	16
1.3.2 Eine spezielle Wahl des inhomogenen Zusatzfeldes	19
1.4 Einfache Abschätzungen	27
1.5 Diskussion der Ergebnisse	31
 2. Erweitertes Solitonenband in planaren Ferromagneten	 37
2.1 Die vollständigen Bewegungsgleichungen	37
2.2 Der Variationsansatz	41
2.3 Analytische und numerische Ergebnisse	45
 3. Der planare Ferromagnet im gekippten Magnetfeld	 52
3.1 Zusammenfassung der Ergebnisse	52
3.2 Die Ginzburg-Landau Entwicklung	54
3.3 Ergebnisse der Variationsrechnung	59
3.4 Die Auswirkungen auf den Strukturfaktor	62

Teil II : ZUM PROBLEM VON CHAOS IN QUANTENSYSTEMEN	70
4. Gibt es Chaos in Quantensystemen ?	70
4.1 Einfache Beispiele klassischer chaotischer Systeme	70
4.2 Die Kolmogorov-Entropie	75
4.3 Der gekickte Rotator	84
4.3.1 Chaotische Bewegung im klassischen System	84
4.3.2 Fastperiodisches Verhalten des quantenmechanischen Systems	89
4.4 Chaos in quantenmechanischen Systemen ?	91
4.4.1 Die Parameter in der Zeitentwicklung	91
4.4.2 Die Rolle des Quasienergiespektrums	93
4.4.3 Spezielle Potentiale	95
4.5 Quantenmechanische Reflexion des klassischen Chaos I	100
4.5.1 Quantisierung auf dem Torus	100
4.5.2 Der Quantenrotator als Grenzfall ?	106
4.6 Quantenmechanische Reflexion des klassischen Chaos II	109
4.6.1 Definition einer quantenmechanischen Informationsentropie	109
4.6.2 Numerische Ergebnisse zum Quantenrotator	116
Literaturverzeichnis	127

ZUSAMMENFASSUNG

Im ersten Teil der Arbeit wird der Nachweis von Solitonen in planaren Ferromagneten (einem Beispiel für reale Festkörpersysteme) diskutiert. Dabei werden die folgenden Fragestellungen behandelt: Lassen sich in diesem System nichtthermische Solitonen erzeugen? Wie sieht die vollständige Dispersionsrelation für diese nichtlinearen Anregungen aus? Wie kann man experimentell überprüfbare Aussagen über diese Dispersionsrelation gewinnen? Die Resultate lassen sich wie folgt zusammenfassen:

Prinzipiell ist die kontrollierte Produktion nichtthermischer Solitonen durch ein zweites Magnetfeld senkrecht zur Ebene leichter Magnetisierung möglich, sofern dieses hinreichend stark und hinreichend inhomogen ist und plötzlich eingeschaltet werden kann. Diese Aussagen konnten mit Hilfe der inversen Streutheorie für die sine-Gordon Gleichung gewonnen werden. Die Schwierigkeiten in der experimentellen Realisierung sollten durch intrinsische räumliche Inhomogenitäten zu überwinden sein.

Die variationsmäßig und numerisch behandelte vollständige Spindynamik liefert für den planaren Ferromagneten ein erweitertes Solitonenband, das den planaren statischen sine-Gordon Grenzfall mit nichtlinearen Anregungen kleiner Amplitude, aber endlicher Geschwindigkeit kontinuierlich verbindet. Die numerische Simulation belegt darüber hinaus die Stabilität aller nichtlinearen Anregungen, die durch das erweiterte Solitonenband beschrieben werden. Die Interpretation der bisherigen Experimente durch das ideale sine-Gordon Modell erweist sich trotz der gefundenen substantiellen Abweichungen als sinnvoll.

In Anwesenheit eines zweiten (statischen, zeitunabhängigen) Magnetfeldes senkrecht zur Ebene leichter Magnetisierung wird die Dispersionsrelation modifiziert. Dies hat zur Folge, daß oberhalb einer kritischen Stärke des Zusatzfeldes der Kink-induzierte Strukturfaktor $S(q, \omega)$ eine Lücke bei

kleine Frequenzen aufweist, die integrierte Intensität $\int d\omega S(q, \omega)$ wächst und die Relaxationszeit $T_1 \sim 1/\int dq S(q, \omega)$ eines mit den Solitonen wechselwirkenden Kernspins deutlich variiert.

Im zweiten Teil wird das Problem von Chaos in Quantensystemen behandelt. An einem in der Literatur detailliert untersuchten Modellsystem, dem gekickten quantenmechanischen Rotator, wird zunächst die Frage untersucht, ob sich ein diffusives Verhalten der kinetischen Energie durch die Wahl spezieller kicking-Potentiale erzwingen läßt. Ein solches lineares Zeitgesetz, das im klassischen System eine Folge der chaotischen Bewegung ist, läßt sich aber nicht finden.

Dann wird diskutiert, ob der Quantenrotator als Grenzfall einer bereits bekannten, auf einem Torus quantisierten Dynamik (mit künstlich eingeführter Periodizität des Impulses) darstellbar ist, um so Aussagen über sein Quasienergiespektrum zu gewinnen. Der angestrebte Grenzprozeß erweist sich aber als nicht durchführbar.

Abschließend wird die Frage behandelt, ob Größen, die das Quantensystem charakterisieren, bei der Annäherung an den klassischen Limes ein unterschiedliches Verhalten zeigen, je nachdem, ob dieser chaotisch ist oder nicht. Dies kann insbesondere für die von uns (in Anlehnung an die klassische Kolmogorov-Entropie) definierte Informationsentropie für Quantensysteme bejaht werden. Diese wird numerisch am Beispiel des Quantenrotators studiert. Ist der angestrebte klassische Grenzfall chaotisch, so weist diese Entropie anfangs einen deutlichen Anstieg auf, d.h. sie kopiert eine Zeitlang das klassische Verhalten. Bei einem regulären klassischen Grenzfall ist ihr Verlauf dagegen von Anfang an fastperiodisch.

EINLEITUNG

In dieser Arbeit werden zwei Themen behandelt, nämlich (in Teil I) der Nachweis von Solitonen in planaren Ferromagneten und (in Teil II) das Problem von Chaos in Quantensystemen. Beide Untersuchungen haben einen wesentlichen Gesichtspunkt gemeinsam: sie betreffen Eigenschaften physikalischer Systeme, die nur wegen der Nichtlinearität der Evolutionsgleichungen auftreten können.

Solitonen (im strengen Sinne) sind Lösungen nichtlinearer, partieller Differentialgleichungen mit besonderen Merkmalen: Es sind lokalisierte Wellenpakete, die ohne Veränderung von Form und Geschwindigkeit propagieren und auch nach einer Kollision mit anderen Solitonen ihre Identität bewahren. Physikalisch gesprochen haben sie teilchenartigen Charakter. In der Festkörperphysik werden sie als mögliche Elementaranregungen in realen Systemen diskutiert. Ein solches System wird in Teil I vorgestellt. Es handelt sich um einen planaren Ferromagneten (z.B. CsNiF_3), dessen Spindynamik bei Anwesenheit eines Magnetfeldes in der Ebene leichter Magnetisierung auf die sine-Gordon Gleichung näherungsweise abgebildet werden kann (Mikeska 1978). Die Solitonlösungen dieser Gleichung genügen der oben angegebenen Definition. Darüber hinaus weist ihr Energiespektrum eine Lücke auf: es existiert eine statische Lösung endlicher Energie, die als Ruheenergie der (Quasi-) Teilchen interpretiert wird. Die Existenz dieser Lücke ermöglicht die Berechnung des Beitrags der Solitonen zu thermodynamischen Größen im phänomenologischen Bild freier Teilchen (Currie et al 1980). (Dies ist bei den Lösungen der sine-Gordon Gleichung, die man als gebundenes Soliton-Antisoliton Paar auffassen kann - die sogenannten 'breather' - nicht möglich.)

Bisher wurden Solitonen als thermisch aktivierte Elementaranregungen diskutiert. Teil I beginnt daher mit der Untersuchung der Frage, ob die Erzeugung nichtthermischer Solitonen im planaren Ferromagneten möglich ist (Hackenbracht und Schuster 1981, Hackenbracht 1982). Eine solche gezielte Produktion zusätzlicher Solitonen und deren experimenteller Nach-

weis sollte zum einen das Solitonenmodell zur Deutung der Experimente unterstützen, da diese lange Zeit umstritten war (Allroth und Mikeska 1980, Loveluck et al. 1980, Reiter 1980). Zum anderen eröffnet ein solches Vorgehen die Möglichkeit, einen interessanten Nichtgleichgewichtszustand zu studieren sowie Probleme der Soliton-Soliton Wechselwirkung (sofern genügend viele erzeugt werden) und der Solitonendiffusion (da die Erzeugung lokal erfolgt). Und schließlich liefert die Frage ein interessantes Beispiel für eine Methode zur Behandlung einer Soliton-tragenden Gleichung (eine Übersicht über die mathematischen Methoden findet man z.B. in Bullough und Caudrey (1980), Lamb (1980), Eilenberger (1981)): Das auftretende Anfangswertproblem wird mit Hilfe der inversen Streutheorie für die sine-Gordon Gleichung gelöst (über die auch die Integrabilität des Systems etabliert wurde). Als Mechanismus zur Erzeugung wird ein zusätzliches Magnetfeld senkrecht zur Ebene leichter Magnetisierung eingeführt, das explizit zeitabhängig und räumlich inhomogen sein muß. Die sich daraus ergebenden experimentellen Schwierigkeiten werden eingehend untersucht und mögliche Auswege aufgezeigt, so daß insgesamt die Erzeugung zusätzlicher Solitonen zwar schwierig, aber nicht unmöglich erscheint.

Es stellt sich natürlich die Frage, inwieweit die Anregungen im realen System die Eigenschaften der idealen sine-Gordon Solitonen besitzen. Dies wird im Kap. 2 untersucht, und zwar mit Hilfe einer variationsmäßigen Lösung der vollständigen Bewegungsgleichungen des Spinsystems als auch durch eine numerische Simulation derselben (Liebmann et al. 1983). Dabei finden wir ein erweitertes Solitonenband (Solitonenenergie als Funktion der Geschwindigkeit), das den stetigen Übergang vom planaren statischen sine-Gordon Soliton endlicher Energie zu Anregungen kleiner Amplitude (verschwindende Energie, aber endliche Geschwindigkeit) beschreibt. Dieser Zerfall des Solitons, das in einem idealen sine-Gordon System topologisch stabil ist, wird dadurch ermöglicht, daß die Anisotropie im realen System nur endlich ist. Sie ist zwar für den planaren Charakter des Ferromagneten verantwortlich, läßt aber Abweichungen aus der Ebene leichter Magnetisierung zu. Alle Anregungen, die durch die

(erweiterte) Dispersion beschrieben werden, sind stabil, wie die numerische Simulation zeigt. Diese Ergebnisse gehen somit über frühere Arbeiten hinaus (Magyari und Thomas 1982, Wysin et al. 1982), die ein Ende des Solitonenbandes aufgrund von Instabilitäten oder Schockwellenphänomenen vorhersagen. Die Existenz einer vertikalen Tangente in der Dispersionskurve bei der sogenannten kritischen Geschwindigkeit u_c wird allerdings bestätigt. Sie begrenzt den unteren Zweig des Solitonenbandes, dessen Anregungen in guter Näherung noch durch die sine-Gordon Solitonen beschrieben werden. Zwar treten deutliche Abweichungen vom planaren Charakter auf (und zwar stärker, als sie von den approximierten Bewegungsgleichungen (Mikeska 1978) vorausgesagt werden) und die Soliton-Antisoliton Streuung ist nicht mehr elastisch. Damit handelt es sich bei diesen nichtlinearen Anregungen im strengen Sinn nicht mehr um Solitonen, sondern um solitäre Wellen. Diese Trennung soll hier aber unberücksichtigt bleiben. Hervorzuheben ist, daß es sich weiterhin um lokalisierte Anregungen handelt, die durch eine Energiebarriere (jedenfalls für die experimentell bisher benutzten Magnetfelder) am Zerfall in den Grundzustand gehindert werden: bei Einführung einer phänomenologischen Dämpfung relaxieren sie zum statischem sine-Gordon Soliton. In diesem Sinne bleiben es teilchenartige Anregungen, deren Erhaltung nicht mehr durch eine topologische Bedingung, sondern durch die Energiebarriere bewirkt wird. Somit erscheint auch die Interpretation der experimentellen Ergebnisse durch das sine-Gordon Modell (unter Zuhilfenahme der oben erwähnten phänomenologischen Beschreibung der Thermodynamik dieses Systems) gerechtfertigt. Diese Experimente scheinen die von Mikeska (1978) getroffene Aussage, daß Solitonen zum zentralen Peak (um $\omega = 0$) im dynamischen Strukturfaktor $S(q, \omega)$ beitragen, zu bestätigen. Sie sind detailliert in einem Übersichtsartikel von Steiner (1983) dargestellt.

Um möglichst experimentell überprüfbaren Aufschluß über die Modifikation der Dispersionsrelation gegenüber dem idealen sine-Gordon Modell zu gewinnen, wird im Kap. 3 der planare Ferromagnet wiederum in einem zusätzlichen Magnetfeld $\tilde{B}$

(senkrecht zur leichten Ebene) betrachtet. Die Einführung dieses neuen Kontrollparameters sollte zu experimentell beobachtbaren Konsequenzen führen (Hackenbracht und Schuster 1983a,b): oberhalb eines kritischen Wertes $\tilde{B}_C$ des Zusatzfeldes tritt im Strukturfaktor eine Lücke für niedrige Frequenzen auf ($S(q, \omega) = 0$ für $|\omega| < \omega_{\min}$). Die Intensität $\int d\omega S(q, \omega)$ des zentralen Peaks nimmt zu. Die Relaxationszeit eines mit dem Solitonengas wechselwirkenden Kernspins (Cs in CsNiF_3), die vom Kehrwert des Integrals $\int dq S(q, \omega)$ abhängt und in einem NMR Experiment gemessen werden kann, zeigt eine deutliche Variation in der Nähe von $\tilde{B}_C$.

Standen im Teil I die Bemühungen im Vordergrund, die Übertragung des Solitonenkonzeptes vom idealen (und integrierbaren) sine-Gordon Modell auf ein reales System zu begründen, so interessieren wir uns im Teil II gerade für den entgegengesetzten Aspekt, nämlich für ein Verhalten von Systemen, das mit dem Begriff 'deterministisches Chaos' beschrieben wird (und Nichtintegrierbarkeit impliziert). Durch diese Bezeichnung soll ausgedrückt werden, daß man das zukünftige Verhalten eines solchen - an sich deterministischen - Systems praktisch nicht vorhersagen kann. Determiniert heißt, daß die Dynamik des Systems durch Gleichungen beschrieben wird, bei denen durch die Vorgabe der Anfangsbedingungen die weitere Entwicklung des Zustands eindeutig festgelegt ist. (Ein bekanntes Beispiel dafür sind Hamilton'sche Systeme.) Auch für chaotische Systeme gilt deshalb, daß der gleiche Ausgangszustand stets zum gleichen Endzustand führt. Aber die Annahme, daß ähnliche (benachbarte) Anfangszustände auch ähnliche Endzustände zur Folge haben, ist falsch. Die (intrinsische) Dynamik chaotischer Systeme ist derart, daß kleine Unterschiede in den Anfangsbedingungen exponentiell verstärkt werden. Auch ohne externes Rauschen (wie es z.B. bei der Bewegung eines Brown'schen Teilchens vorliegt) kann sie u.U. dazu führen, daß Werte von Meßgrößen diffundieren.

Chaotisches Verhalten in klassischen Systemen ist sehr häufig: Erwähnt sei nur, daß es für die meisten (!) Hamilton'schen Systeme zutrifft (Helleman 1983; als Beispiele werden das 'alte' Dreikörperproblem und das 'moderne' Problem von

Teilchen in Beschleunigern aufgeführt), und daß es das Verhalten von Flüssigkeiten beim Auftreten von Turbulenzen (Graham 1982, Libchaber et al. 1982) charakterisiert. Sehr viel mehr Beispiele (mit den entsprechenden Referenzen) sind bei Schuster (1984) aufgeführt.

In den Kapn. 4.1 und 4.2 werden zunächst wichtige Größen zur Charakterisierung chaotischen Verhaltens (Liapunov-Exponent, Kolmogorov-Entropie) eingeführt. In Kap. 4.3 wird an einem ausführlich studierten Modell, dem gekickten Rotator, gezeigt, daß sich das Verhalten des quantisierten Systems drastisch vom klassischen unterscheidet. Während das klassische Pendel chaotisches Verhalten zeigt (Chirikov 1979), findet man im Quantenfall einen fastperiodischen Verlauf (Hogg und Huberman 1982). Im Kap. 4.4 werden Einzelheiten der quantenmechanischen zeitlichen Entwicklung (ihre Parameter und das Quasienergiespektrum) diskutiert sowie die Möglichkeit untersucht, durch spezielle Potentiale eine Diffusion der kinetischen Energie zu erzwingen. Solch ein lineares Zeitgesetz, das im klassischen Fall chaotisches Verhalten signalisiert, konnte aber nicht gefunden werden. Daher wird in den letzten beiden Kapiteln die Frage untersucht, ob sich bei charakteristischen Größen eines Quantensystems noch Unterschiede feststellen lassen, je nachdem ob das klassische Pendant chaotisch ist oder nicht.

Hannay und Berry (1980) haben in diesem Sinne das Quasienergiespektrum einer Dynamik untersucht, die auf einem zweidimensionalen Torus quantisiert ist (Ort und Impuls sind periodischen Randbedingungen unterworfen; s. Kap. 4.5). Sie können zeigen, daß der Zeitentwicklungsoperator U , dessen Eigenwerte das Quasienergiespektrum definieren, periodisch ist, d.h. $U^{\tilde{n}}$ entspricht dem Identitätsoperator. Diese Periode $\tilde{n}$ zeigt ein friedliches bzw. ein sehr erratisches Verhalten bei Annäherung an einen regulären bzw. chaotischen klassischen Grenzfall. Die Dynamik dieses (lösbaren) Modells ist einigen Einschränkungen unterworfen. Wir haben versucht, die (künstliche) Periodizität des Impulses zu beseitigen (indem wir die Periode gegen unendlich gehen lassen), um so den Quantenrotator als Grenzfall der Hannay-Berry Dynamik zu

erhalten und Aussagen über dessen Quasienergiespektrum zu gewinnen. Leider erweist sich dieser Grenzprozeß aufgrund der starken Restriktionen des Modells als nicht durchführbar.

Im letzten Kapitel - 4.6 - schlagen wir eine Informationsentropie für quantenmechanische Systeme vor, die von der von Kosloff und Rice (1981) getroffenen Übertragung der klassischen Kolmogorov-Entropie auf Quantensysteme in einem wichtigen Punkt (wie wir zeigen können begründet) abweicht. Die so definierte Größe wird dann für den Quantenrotator (numerisch) berechnet, und zwar für verschiedene Parameterwerte der zeitlichen Entwicklung, die - je nach Größe - klassisches Chaos implizieren oder nicht. Die Annäherung an den klassischen Limes wird durch eine Variation des Planck'schen Wirkungsquantums simuliert. Dabei zeigt sich, daß die Informationsentropie eine Größe darstellt, die ebenfalls die unterschiedliche Natur des angestrebten klassischen Grenzfalles reflektiert: Sie zeigt einen deutlichen Anstieg zu Beginn der zeitlichen Entwicklung, falls das klassische System chaotisch ist, und verhält sich in den anderen Fällen direkt fastperiodisch.

TEIL I : ZUM NACHWEIS VON SOLITONEN IN PLANAREN FERROMAGNETEN

1. ERZEUGUNG NICHTTHERMISCHER SOLITONEN

1.1 Das Modell

In diesem Kapitel soll die Möglichkeit diskutiert werden, nichtthermische Solitonen in einem eindimensionalen planaren Ferromagneten zu erzeugen. Ein solches System liegt z.B. in der Substanz CsNiF_3 vor (Steiner et al. 1971). Ihre räumliche Struktur ist in Fig. 1.1 dargestellt. Die ferromagnetische Wechselwirkung (Kopplungskonstante $J > 0$) zwischen den Ni-Ionen innerhalb einer Kette wird durch Superaustausch über die F-Ionen vermittelt. Die oktaedrische Anordnung der F-Ionen ist auch für die Kristallfeldaufspaltung der Ni-Zustände verantwortlich, die zu einer Ein-Ionen-Anisotropie führt.

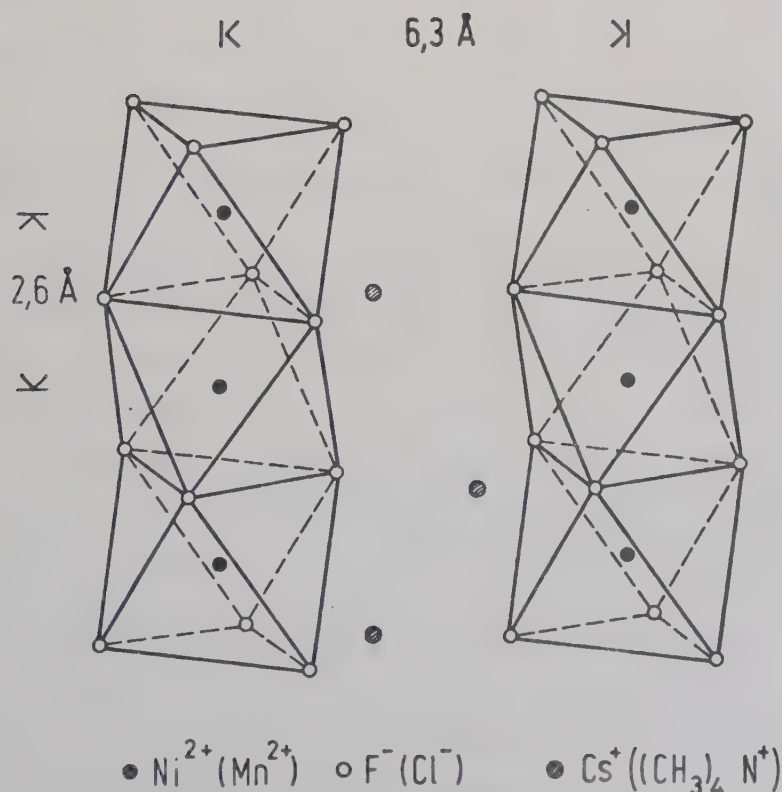


Fig. 1.1 Die Struktur von CsNiF_3 .

Diese zeichnet für die Dynamik der Ni-Spins ($S = 1$) die Ebene senkrecht zur Kettenrichtung als leichte Ebene aus.

Der Abstand zwischen den NiF_3 -Ketten, die durch die Cs-Ionen getrennt sind, ist sehr viel größer als der Abstand zwischen zwei Ni-Ionen innerhalb einer Kette. Entsprechend ist das Verhältnis der Zwischenkettenkopplung J' zur Kopplungskonstante J klein. ($J'/J \sim 10^{-3}$ für $T > T_N = 2.61 \text{ K}$; T_N ist die Néeltemperatur. Für $T < T_N$ geht das System in eine dreidimensionale, zwischen den Ketten antiferromagnetisch geordnete Phase über.) Für $T > T_N$ kann eine Spinkette als gute Realisierung eines eindimensionalen Systems angesehen werden, beschrieben durch den Hamiltonian

$$H = \sum_i \left(-J \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1} + A S_{i,z}^2 - g \mu_B B S_{i,x} \right) \quad (1.1)$$

Der erste Term stellt die bekannte Heisenberg-Austauschkopplung dar, der zweite resultiert aus der planaren Anisotropie, durch die die z-Komponente der Spins stark unterdrückt wird ($A > 0$), solange $T \ll \sqrt{A J}$ (Mikeska 1978). Die Modellparameter haben die Werte $J/k_B = 23.6 \text{ K}$ und $A/k_B = 4.5 \text{ K}$ (Steiner und Kjems 1977). Der Wert für A ist gültig im Rahmen einer klassischen Behandlung des Systems (Steiner und Dorner 1973), deren Gültigkeit (auch für $S = 1$) von Mikeska und Patzak (1977) gezeigt wurde. Der Zeeman-Term in (1.1) beschreibt die Wechselwirkung der Spins mit einem Magnetfeld $\vec{B}$ parallel zur x-Achse (Fig. 1.2). Dieses Feld bricht also die Symmetrie in der leichten Ebene ($g = 2.4$).

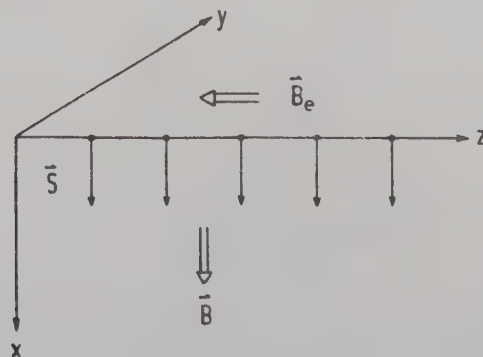


Fig. 1.2 Die Geometrie des Modells.

Mikeska (1978) hat gezeigt, daß die Spindynamik des durch den Hamiltonian (Gl. (1.1)) beschriebenen Systems näherungsweise durch die sine-Gordon Gleichung wiedergegeben wird, deren (einfachste) nichtlineare Lösungen (die Solitonen) als elementare Anregungen auftreten und z.B. zum dynamischen Strukturfaktor $S_{\alpha\alpha}(q,\omega)$ beitragen sollten ($S_{\alpha\alpha}(q,\omega)$ ist die Fouriertransformierte der Korrelationsfunktion für die Spin-komponente S_{α} ; siehe auch Kap. 3.4). Aus einer Reihe von Experimenten (Kjems und Steiner 1978, Steiner 1979, Steiner et al. 1982, Steiner 1983) kann man schließen, daß diese theoretische Voraussage zutrifft: thermisch angeregte Solitonen sind (ganz oder teilweise, je nach betrachteter Spin-komponente) für den zentralen Peak (um $\omega = 0$) in $S_{\alpha\alpha}(q,\omega)$ verantwortlich.

Diese Interpretation war zunächst umstritten, da insbesondere auch Zwei-Spinwellen-Prozesse zum zentralen Peak beitragen können (Allroth und Mikeska 1980, Loveluck et al. 1980, Reiter 1980). Daher bestand ein Ziel unserer Untersuchung (Hackenbracht und Schuster 1981) darin, das Solitonenbild durch eine kontrollierte Erzeugung dieser Elementaranregungen mit Hilfe eines zusätzlichen Magnetfeldes $\vec{B}_e$ zu unterstützen. Da insbesondere die Zahl dieser nichtthermischen Solitonen nicht von der Temperatur, sondern von der Stärke dieses zusätzlichen Feldes abhängt, sollte ihr Beitrag zum Strukturfaktor erkennbar sein.

Im folgenden Abschnitt soll zunächst die sine-Gordon Gleichung aus dem Hamiltonian (Gl. (1.1)) hergeleitet und anschließend die notwendigen Modifikationen durch das zusätzliche Magnetfeld diskutiert werden. Das Prinzip, das zur Erzeugung nichtthermischer Solitonen führt, sei aber schon an dieser Stelle erwähnt: Das zweite Magnetfeld $\vec{B}_e(z,t)$ liegt parallel zur Kettenrichtung (der z-Achse), steht also senkrecht zur leichten x,y-Ebene (s. Fig. 1.2). Im Gegensatz zum symmetriebrechenden Feld $\vec{B}$ (parallel zur x-Achse) ist es sowohl zeit- als auch ortsabhängig. Wird dieses Feld lokal eingeschaltet, so beginnen die Spins in dieser Region um die z-Achse zu präzedieren, d.h. sie versuchen in der

x,y-Ebene Drehungen um 2π zu beschreiben. Aus einer solchen Startkonfiguration heraus können sich Solitonen unter geeigneten Bedingungen entwickeln.

1.2 Die modifizierte sine-Gordon Gleichung

In der klassischen Behandlung kann man einen Spin $\vec{S}$ als Vektor, parametrisiert in Polarkoordinaten, darstellen

$$\vec{S} = S \cdot [\cos \varphi(z,t) \cos \Theta(z,t), \sin \varphi(z,t) \cos \Theta(z,t), \sin \Theta(z,t)] \quad (1.2)$$

Der Winkel φ beschreibt die Bewegung in der leichten Ebene, der Winkel Θ die Bewegung aus dieser Ebene heraus ($\Theta = 0$ bedeutet, der Spin befindet sich in der x,y-Ebene). Nimmt man an, daß $|\Theta| \ll 1$ und daß die Winkel nur langsam veränderliche Funktionen des Ortes sind, kann man den Hamiltonian H in Θ entwickeln und zum Kontinuumslimit übergehen (Mikeska 1978)

$$H \rightarrow H_0 = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dz}{a} \left\{ \frac{1}{2} J a^2 S^2 \left(\frac{\partial \varphi(z,t)}{\partial z} \right)^2 + A S^2 \Theta^2(z,t) + g \mu_B B S \left(1 - \cos \varphi(z,t) \right) \right\} ; \quad (1.3)$$

a ist der Abstand zweier Ni-Ionen innerhalb der Kette. Die Grundzustandsenergie wurde subtrahiert.

Die Hamilton'schen Bewegungsgleichungen für die kanonisch konjugierten Variablen φ und $\hbar \Theta$ lauten

$$\hbar S \frac{\partial \varphi}{\partial t} = 2 A S^2 \Theta \quad (1.4a)$$

$$\hbar S \frac{\partial \Theta}{\partial t} = J a^2 S^2 \frac{\partial^2 \varphi}{\partial z^2} - g \mu_B B S \sin \varphi \quad (1.4b)$$

Daraus erhält man für den Winkel φ die sine-Gordon Gleichung

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial t^2} - c_0^2 \frac{\partial^2 \varphi}{\partial z^2} + \omega_0^2 \sin \varphi = 0 \quad , \quad (1.5)$$

wobei $c_0^2 = 2 A J S^2 a^2 \hbar^{-2}$ und $\omega_0^2 = 2 A g \mu_B B S \hbar^{-2}$.
 c_0 ist die asymptotische Phasengeschwindigkeit der kleinen Oszillationen von Gl. (1.5), ω_0 die Lücke im Spektrum dieser Anregungen. Man erkennt, daß das symmetriebrechende Magnetfeld $\vec{B}$ für die Nichtlinearität verantwortlich ist. Die statische Kinklösung von Gl. (1.5) lautet

$$\varphi(z) = 4 \arctan \left(e^{\pm z/d_0} \right) \quad . \quad (1.6)$$

Die Lösung mit dem positiven Vorzeichen im Exponenten wird als Soliton, die andere als Antisoliton bezeichnet. Diese Unterscheidung wird im folgenden aber nur dort getroffen, wo sie notwendig ist. Ansonsten wird die Bezeichnung Soliton (oder Kink) verwendet. $\varphi(z)$ beschreibt eine Spinkonfiguration, innerhalb derer der Winkel φ sich genau um 2π ändert. Diese Variation ist im wesentlichen auf einen Bereich $2 d_0$ (mit $d_0 = c_0/\omega_0$) um $z = 0$ (Zentrum des Solitons mit $\varphi = \pi$) beschränkt. Um die Gültigkeit des Kontinuumslimites zu gewährleisten, darf das Magnetfeld $\vec{B}$ nicht zu groß sein. Experimentell werden typischerweise Felder zwischen 5 und 10 KG verwendet (d_0 zwischen 5 und 3.5 Gitterkonstanten). Die Spins werden innerhalb eines Solitons also aus dem Grundzustand ($\varphi = 0$) herausgedreht, bis sie - über die energetisch ungünstigste Stellung $\varphi = \pi$ - wieder den Grundzustand ($\varphi = 2\pi$) erreichen. Die Energie dieser statischen Konfiguration (also die Ruheenergie des Solitons) ist $E_0 = 8 S (J g \mu_B B S)^{1/2}$.

Die mit einer Geschwindigkeit v laufende Lösung ist gegeben durch

$$\varphi(z,t) = 4 \arctan \exp \left\{ \pm \gamma(z-vt)/d_0 \right\} \quad (1.7a)$$

mit $\gamma = (1 - v^2/c_0^2)^{-1/2}$. Während die statische Lösung streng planar ist ($\theta = 0$), ist die dynamische stets mit einer Spinkomponente aus der Ebene heraus verbunden: Aus (1.4a) folgt:

$$\theta = \left(\frac{g \mu_B B}{2 A S} \right)^{1/2} \gamma \left(\mp \frac{v}{c_0} \right) \frac{2}{\cosh \{ \gamma (z - vt) / d_0 \}} \quad (1.7b)$$

Wegen $|\theta| \ll 1$ dürfen die Geschwindigkeiten nicht zu groß werden (für $B = 5.4 \text{ KG}$ ist $g \mu_B B / 2 A S = 0.1$. Mit $v = 0.5 c_0$ ergibt sich ein maximales $\theta = 0.55$). Solitonen (oberes Vorzeichen in Gl. (1.7)) und Antisolitonen (unteres Vorzeichen) mit gleicher Bewegungsrichtung unterscheiden sich im Drehsinn des Winkels φ und im Vorzeichen der S_z -Komponente, also θ .

Berücksichtigt man jetzt auch das zusätzliche, in Kettenrichtung angelegte Feld $\vec{B}_e(z, t) = - B_e(z, t) \vec{e}_z$ (das Vorzeichen dient nur der vereinfachten Darstellung), so wird das System durch den Hamiltonian

$$\begin{aligned} \tilde{H} &= H_0 + H_1 \\ H_1 &= \int \frac{dz}{a} \left\{ g \mu_B B_e(z, t) S \theta(z, t) \right\} \end{aligned} \quad (1.8)$$

beschrieben. H_1 enthält die Wechselwirkung der Spins mit dem neuen Feld ($S_z = \sin \theta \approx \theta$). Nur Gl. (1.4a) wird erweitert

$$\hbar S \frac{\partial \varphi}{\partial t} = 2 A S^2 \theta + g \mu_B B_e(z, t) S \quad (1.9)$$

Der zusätzliche Term beschreibt die Larmorpräzession der Spins um das Feld $\vec{B}_e$. Daraus erhält man die modifizierte sine-Gordon Gleichung

$$\ddot{\varphi} - \varphi'' + \sin \varphi = \frac{g \mu_B \dot{B}_e(z, t)}{\hbar \omega_0} \quad (1.10)$$

Die Ableitungen nach der Zeit (jetzt in Einheiten von $1/\omega_0$) sind mit dem Punkt, die nach dem Ort z (in Einheiten von d_0) mit dem Strich gekennzeichnet.

Wenn man als zeitlichen Verlauf des Zusatzfeldes eine Stufenfunktion annimmt (das Feld wird zur Zeit $t = 0$ plötzlich angeschaltet), so ist

$$\dot{B}_e(z, t) = B_e(z) \delta(t) \quad . \quad (1.11)$$

Gleichung (1.10) kann jetzt auf ein Anfangswertproblem reduziert werden

$$\ddot{\varphi} - \varphi'' + \sin \varphi = 0 \quad , \quad t > 0$$

$$\varphi(z, 0) = 0$$

$$(1.12)$$

$$\dot{\varphi}(z, 0) = \frac{g \mu_B B_e(z)}{\hbar \omega_0}$$

Die letzte Gleichung ergibt sich aus der (auf dimensionslose Größen umgeschriebenen) Gl. (1.9). Es wurde angenommen, daß sich das System für $t < 0$ im klassischen Grundzustand ($\theta \equiv 0$, $\varphi \equiv 0$) befindet. Die in (1.12) gegebene Problemstellung kann man mit Hilfe der inversen Streutheorie lösen. Es sei an dieser Stelle bemerkt, daß wir nach Veröffentlichung unserer Ergebnisse (Hackenbracht und Schuster 1981) auf eine Arbeit von Maki und Kumar (1976) aufmerksam gemacht wurden, in denen für die A-Phase vom superfluiden ^3He ähnliche Überlegungen durchgeführt werden. Vor allem die geometrischen Einschränkungen und die experimentelle Realsisierung (siehe die Diskussion in Kap. 1.5) sind in dem hier behandelten Spinsystem aber verschieden.

Im folgenden Abschnitt wird detailliert die Lösung des Anfangswertproblems studiert. Die Resultate sind in den Kapn. 1.4 und 1.5 zusammengefaßt.

1.3 Lösung des Anfangswertproblems

1.3.1 Das direkte Streuprobblem für die sine-Gordon Gleichung

Die inverse Streutheorie ist ein Verfahren zur Lösung eines Anfangswertproblems, so wie es z.B. in Gl. (1.12) gegeben ist, mit Hilfe eines Umweges, da die direkte Integration nicht möglich ist. Zunächst wird ein Eigenwertproblem (direktes Streuprobblem) aufgestellt, wobei in den Operator die Anfangsbedingungen (bei der sine-Gordon Gleichung also $\varphi(z,0)$, $\dot{\varphi}(z,0)$) eingehen. Dieser Operator sowie die zeitliche Entwicklung seiner Eigenfunktionen müssen so bestimmt werden, daß sich sein Spektrum nicht ändert, wenn man die (noch unbekannte) Lösung $\varphi(z,t)$ (zu einem späteren Zeitpunkt $t > 0$) in das Eigenwertproblem einsetzt. Die Lösung des Eigenwertproblems liefert Streudaten, aus denen die gesuchte Lösung für alle Zeiten rekonstruiert werden kann (inverses Streuprobblem). Besonders aufschlußreich ist die Natur des Spektrums: sind gebundene Zuständen vertreten, so enthält die Anfangskonfiguration (gegeben durch $\varphi(z,0)$, $\dot{\varphi}(z,0)$) die teilchenartigen Anregungen der sine-Gordon Gleichung (also Solitonen, Antisolitonen, breather). Man muß sich diese Konfiguration als eine nichtlineare Überlagerung dieser Lösungen vorstellen (ggf. zusammen mit den kleinen Oszillationen, die mit dem kontinuierlichen Spektrum verknüpft sind). Da das Spektrum des Operators nicht von der Zeit abhängt, sind diese Ein-Teilchen-Lösungen stets in $\varphi(z,t)$ enthalten. Für große Zeiten werden sie (wegen ihrer i.a. unterschiedlichen Geschwindigkeiten) räumlich separieren und einzeln identifizierbar sein.

Das mit der sine-Gordon Gleichung assoziierte direkte Streuprobblem wurde von Ablowitz et al (1973) gefunden. Zunächst bringt man die sine-Gordon Gleichung, wie sie in (1.12) gegeben ist, durch die Variablentransformation $x = \frac{1}{2} (z+t)$, $y = \frac{1}{2} (z-t)$ und $\varphi(z,t) = \varphi(x,y)$ auf die Form

$$\frac{\partial^2 \varphi(x,y)}{\partial x \partial y} = \sin \varphi(x,y) \quad . \quad (1.13)$$

Das Eigenwertproblem muß für ein zweikomponentiges Feld $\psi = \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \end{pmatrix}$ aufgestellt werden:

$$\frac{\partial v_1}{\partial x} + i \xi v_1 = q(x, y) v_2 \quad (1.14a)$$

$$\frac{\partial v_2}{\partial x} - i \xi v_2 = -q(x, y) v_1, \quad (1.14b)$$

wobei $q(x, y) = -\frac{1}{2} \frac{\partial \varphi}{\partial x}$. x ist in diesem Problem als Ortsvariable, y als Zeitvariable anzusehen. Der Eigenwert ist genau dann von der Zeit (also y) unabhängig, wenn ψ der folgenden zeitlichen Entwicklung genügt:

$$\frac{\partial v_1}{\partial y} = \frac{i}{4\xi} (v_1 \cos \varphi + v_2 \sin \varphi) \quad (1.15a)$$

$$\frac{\partial v_2}{\partial y} = \frac{i}{4\xi} (v_1 \sin \varphi - v_2 \cos \varphi) \quad (1.15b)$$

Beide Gleichungen kann man formal zu einer zusammenfassen, die dann wie eine zeitabhängige Schrödingergleichung aussieht:

$$i \frac{\partial \psi}{\partial y} = \hat{H} \psi, \quad \hat{H} = -\frac{1}{4\xi} \begin{pmatrix} \cos \varphi & \sin \varphi \\ \sin \varphi & -\cos \varphi \end{pmatrix}. \quad (1.16)$$

Differenziert man z.B. (1.14a) nach der Zeit (y), erhält man

$$\frac{\partial^2 v_1}{\partial x \partial y} + i \frac{\partial \xi}{\partial y} v_1 + i \xi \frac{\partial v_1}{\partial y} = \frac{\partial q}{\partial y} v_2 + q \frac{\partial v_2}{\partial y}. \quad (1.17)$$

Den ersten Term beschafft man sich durch Differentiation von (1.15a) nach x . Wenn $q(x, y)$ der sine-Gordon Gleichung genügt, also

$$\frac{\partial q}{\partial y} = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x \partial y} = -\frac{1}{2} \sin \varphi, \quad (1.18)$$

so ergibt sich die geforderte zeitliche Unabhängigkeit des Eigenwertes

$$\frac{\partial \xi}{\partial y} = 0. \quad (1.19)$$

Durch Rücktransformation kann man das Problem auch wieder in den alten Variablen (z, t) formulieren (Ablowitz et al. 1973, Kaup 1975)

$$i \psi' + \left\{ \sin \frac{\varphi}{2} \left[\sigma_1 \cos \frac{\varphi}{2} - \sigma_3 \sin \frac{\varphi}{2} \right] - \sigma_2 \frac{1}{4} \left[\dot{\varphi} + \varphi' \right] \right\} \psi = k \sigma_3 \psi \quad (1.20)$$

wobei

$$k = \frac{1}{2} \xi - \frac{1}{8} \xi^{-1} \quad . \quad (1.21)$$

Die Matrizen σ_i sind die Pauli-Spinmatrizen.

Wir verwenden für $\varphi(z, t)$ (daraus folgt $\varphi'(z, t)$) und $\dot{\varphi}(z, t)$ die Anfangsbedingungen aus Gl. (1.12). Das direkte Streuprobblem vereinfacht sich dann erheblich

$$i v_1' + \frac{i}{4} \dot{\varphi}(z, 0) v_2 - k v_1 = 0 \quad (1.22a)$$

$$i v_2' - \frac{i}{4} \dot{\varphi}(z, 0) v_1 + k v_2 = 0 \quad , \quad (1.22b)$$

ψ genügt den Randbedingungen

$$\psi(z) \rightarrow \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} e^{-ikz} \quad , \quad z \rightarrow -\infty \quad (1.23a)$$

$$\psi(z) \rightarrow a(k) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} e^{-ikz} + b(k) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} e^{ikz} \quad , \quad z \rightarrow \infty \quad . \quad (1.23b)$$

Diese asymptotische Darstellung von $\psi(z)$ folgt schon aus Gl. (1.20), da man verlangt, daß

$$\begin{aligned} \varphi(z, t) &\rightarrow n 2\pi \quad \text{für} \quad |z| \rightarrow \infty \\ \dot{\varphi}(z, t) &\rightarrow 0 \quad \text{für} \quad |z| \rightarrow \infty \end{aligned} \quad (1.24)$$

Diesen Forderungen müssen natürlich auch unsere speziellen Anfangswerte genügen.

Dann entkoppeln die Gleichungen und es gilt $v_1 \rightarrow e^{-ikz}$, $v_2 \rightarrow e^{+ikz}$. Das Vorzeichen im Exponent ist also an eine bestimmte Komponente von $\psi(z)$ geknüpft (natürlich hat man noch die Freiheit, für die ungestreute ebene Welle ein Vorzeichen auszuwählen). Für reelles k stellen $a(k)$ und $b(k)$ die Streudaten dar. $1/a(k)$ kann als Transmissionskoeffizient, $b(k)/a(k)$ als Reflexionskoeffizient interpretiert werden ($|a(k)|^2 = 1 + |b(k)|^2$). Ist k komplex, so erfordert die Normierbarkeit der Funktion $\text{Im } k > 0$ sowie

$$a(k) = 0 \quad . \quad (1.25)$$

Diese Bedingung liefert die gebundenen Zustände. Die diskreten Eigenwerte sowie das Residuum von $b(k)/a(k)$ (an der Nullstelle von $a(k)$) repräsentieren dann die Streudaten (Kaup 1975, vgl. auch Eilenberger 1981).

1.3.2 Eine spezielle Wahl des inhomogenen Zusatzfeldes

Um das direkte Streuproblem nun konkret lösen zu können, muß noch $\dot{\psi}(z,0)$ spezifiziert werden. Da $\dot{\psi}(z,0) \sim B_e(z)$ (Gl. (1.12)), müssen wir die räumliche Variation des Zusatzfeldes festlegen. Es muß auf jeden Fall inhomogen sein, da ein lokalisiertes Objekt wie ein Soliton nicht aus einer uniformen Anregung der gesamten Spinkette entstehen kann. Nimmt man als experimentelle Situation etwa einen linearen Abfall von $B_e(z)$ an (Fig. 1.3), so soll dieser durch eine Stufe approximiert werden, um eine analytische Behandlung von Gl. (1.22) zu ermöglichen. Wie in Fig. 1.3 angedeutet, muß man bei einem Experiment auch davon ausgehen, daß das Magnetfeld sich über die Probenenden (z_A, z_B) hinaus erstreckt ($z_2 > z_B$). Auf das direkte Streuproblem übertragen bedeutet dies, daß das 'Potential' $\dot{\psi}(z,0)$ für $|z| \rightarrow \infty$ nicht verschwindet (die Rechnungen werden wie üblich für ein unendlich ausgedehntes

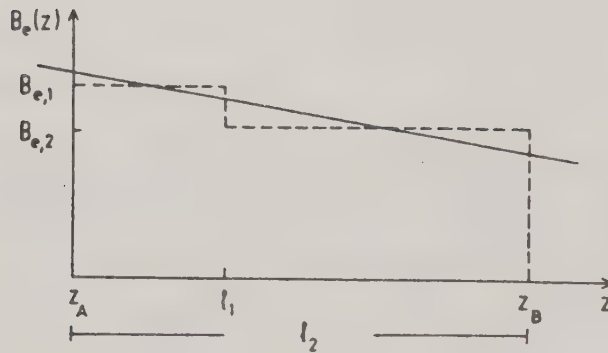


Fig. 1.3 Räumliche Variation des Zusatzfeldes (durchgezogene Linie: experimentelle Situation; gestrichelte Linie: in den Rechnungen benutzte Approximation).

System durchgeführt, so daß man die Probenenden - genauer gesagt die Enden einer Spinkette - mit $|z| \rightarrow \pm \infty$ identifizieren muß. Dies ist auch so lange gerechtfertigt, wie die Ausdehnung des Systems groß ist gegenüber der charakteristischen Länge d_0 eines Solitons). Dies ist für die asymptotische Bestimmung von $\psi(z)$ aber unerlässlich (Gl. (1.24)). Bei $z = z_A$ kann man die Schwierigkeit beheben, indem man die Kette (mit $z > z_A$) an der B_e -Achse spiegelt und dann z_A als Ursprung ($z = 0$) für das Gesamtsystem (physikalisches System plus Spiegelbild) definiert. Um das Problem am anderen Probenende z_B zu umgehen, nehmen wir zunächst an, daß für die Ausdehnung l_2 des Feldes gilt: $l_2 \ll z_B$. Wir zeigen dann, daß der Grenzfall $l_2 \rightarrow z_B$ für die Resultate nicht ausschlaggebend ist, solange $B_{e,2}$ (s. Fig. 1.3) hinreichend klein ist.

Die Anfangsbedingungen für das Gesamtsystem lauten dann

$$\dot{\varphi}(z,0) = \begin{cases} 2 \tau_1 & \text{für } |z| < l_1 \\ 2 \tau_2 & \text{für } l_1 < |z| < l_2 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (1.26)$$

$$\varphi(z,0) = 0 ,$$

wobei $2 \tau_i = g \mu_B B_{e,i} / (\hbar \omega_0)$.

Das Gleichungssystem (1.22) läßt sich in eine Art Schrödinger-gleichung für nur eine Komponente von $\psi(z)$ umformen: Sinnvollerweise betrachtet man die Komponente $v_1(z)$, da sie in der speziellen Darstellung von $\psi(z)$ bevorzugt ist (nur sie soll für $z \rightarrow -\infty$ vorhanden sein). Man erhält

$$\left(-\frac{d^2}{dz^2} + V(z) - k^2\right) v_1(z) = 0 \quad . \quad (1.27a)$$

Die Komponente $v_2(z)$ ergibt sich dann aus Gl. (1.22a):

$$v_2(z) = 4 \left(-i k v_1(z) - v_1'(z)\right) / \dot{\psi}(z, 0) \quad . \quad (1.27b)$$

Das Potential $V(z)$ hängt mit der Anfangsbedingung $\dot{\psi}(z, 0)$ aus (1.26) zusammen (s. Fig. 1.4)

$$V(z) = \begin{cases} 0 & \text{für } z < -l_2 \\ -\tau_2^2/4 & \text{für } l_1 < |z| < l_2 \\ -\tau_1^2/4 & \text{für } |z| < l_1 \\ 0 & \text{für } z > l_2 \end{cases} \quad . \quad (1.28)$$

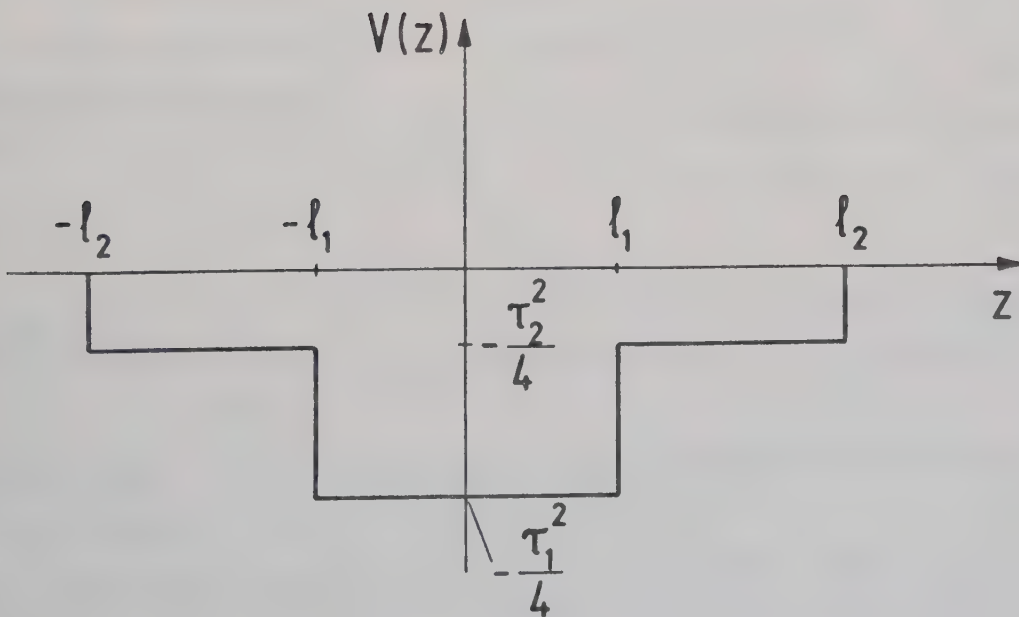


Fig. 1.4 Potential für die Schrödingergleichung.

Da das streuende Potential für $|z| > \ell_2$ verschwindet, muß $\psi(z)$ für $|z| = \ell_2$ bereits die asymptotische Form (1.23) annehmen. Dies liefert Bedingungen für die Komponenten:

$$\begin{aligned} v_1(\ell_2) &= a(k) e^{-ik\ell_2} \\ v_1(-\ell_2) &= e^{ik\ell_2} \\ v_2(\ell_2) &= b(k) e^{ik\ell_2} \\ v_2(-\ell_2) &= 0 \end{aligned} \quad (1.29)$$

Die (stetige) Anpassung der Lösungen aus dem Innern des Potentialtopfs an obige Form liefert dann gerade die Streudaten $a(k)$ und $b(k)$. (Es sei erwähnt, daß man bei $|z| = \ell_1$ die Differenzierbarkeit der Funktion nicht gegeben ist. Dies ergibt sich aus Gl. (1.22), da $\dot{\phi}(z,0)$ an diesen Stellen springt. Die Gl. (1.27a) ist an diesen Punkten nicht definiert. Man kann sie aber in jedem der Teilbereiche, wo $\dot{\phi}(z,0)$ stetig ist, lösen und diese Lösungen stetig zu den gesuchten Funktionen $v_i(z)$ zusammensetzen.)

Die gesuchten gebundenen Zustände erhält man dann aus $a(k) = 0$. Dies entspricht einer veränderten Randbedingung für v_1 bei $z = \ell_2$, nämlich $v_1(\ell_2) = 0$. Wenn man sich nur für die gebundenen Zustände interessiert, kann man in Gl. (1.27a) das modifizierte Potential

$$\tilde{V}(z) = \begin{cases} V(z) & , \quad z < \ell_2 \\ \infty & \quad z \geq \ell_2 \end{cases} \quad (1.30)$$

verwenden. Die unendlich hohe Wand bei $z = \ell_2$ gewährleistet $v_1(\ell_2) = 0$. Die Schrödingergleichung (1.17a) mit dem Potential $\tilde{V}(z)$ kann jetzt für die verschiedenen 'Energien' k^2 gelöst werden. Da für die gebundenen Zustände $k^2 < 0$ gilt, ist k rein imaginär, also $k = i\kappa$, $\kappa > 0$ (damit $\text{Im}k > 0$).

Die Zuordnung der gebundenen Zustände des direkten Streuproblems zu den teilchenartigen Lösungen der sine-Gordon Gleichung erfolgt mit Hilfe des Eigenwertes ξ aus Gl. (1.14) (Kaup 1975, vgl. auch Eilenberger 1981). Angenommen, wir hätten das Streuproblem (1.27) bereits gelöst, also κ bestimmt. Dann ergibt sich ξ über die Gl. (1.21). Setzt man $\xi = R e^{i\eta}$ ($0 \leq \eta \leq \pi$), liefert (1.21) den Ausdruck

$$k = \left(\frac{R}{2} - \frac{1}{8R} \right) \cos \eta + i \left(\frac{R}{2} + \frac{1}{8R} \right) \sin \eta \quad . \quad (1.31)$$

Für die gebundenen Zustände muß $\operatorname{Re} k = 0$, also $R = 1/2$ oder $\eta = \pi/2$. Für den Imaginärteil gilt dann

$$\kappa = \frac{1}{2} \sin \eta < \frac{1}{2} \quad (\text{für } R = 1/2) \quad (1.32a)$$

bzw.

$$\kappa = \frac{R}{2} + \frac{1}{8R} > \frac{1}{2} \quad (\text{für } \eta = \pi/2) \quad (1.32b)$$

(solange $R > 0$) .

Wenn aus (1.27) also folgt, daß $-\frac{1}{4} < k^2 < 0$, also $0 < \kappa < \frac{1}{2}$, so muß $R = 1/2$ und η ergibt sich aus (1.32a), wobei $\eta = \arcsin 2\kappa$ und $\eta = \pi$ Lösungen sind. Für ξ erhält man also die beiden Werte

$$\xi_{1,2}(\kappa) = \frac{1}{2} (\pm \cos \eta + i \sin \eta) \quad . \quad (1.33a)$$

Ein solches Paar von Eigenwerten gehört zu einem gebundenen Soliton-Antisoliton Paar, einem sogenannten 'breather' (Kaup 1975). Ist dagegen $\kappa > \frac{1}{2}$, so muß $\eta = \frac{\pi}{2}$, und $R_{1,2} = \pm(\kappa^2 - 1/4)^{1/2} + \kappa$ aus (1.32b). Damit folgt

$$\xi_{1,2}(\kappa) = i R_{1,2} \quad (R_{1,2} > 0) \quad . \quad (1.33b)$$

Ein solches Paar von Eigenwerten ist mit einem Soliton-Antisoliton Paar verknüpft. Da wir nur an solchen interessiert sind (nur ihr Beitrag zum dynamischen Strukturfaktor ist

bislang diskutiert worden), müssen wir auch nur solche Eigenwerte k^2 des Streuproblems (1.27) berechnen, die zu $\kappa > \frac{1}{2}$ führen.

Wählt man nun $\tau_1 > 1$ und $\tau_2 < 1$, so trifft dies nur für $-\tau_1^2/4 < k^2 < -\tau_2^2/4$ zu. Für diesen 'Energie'bereich wird jetzt das Gleichungssystem (1.27) (mit dem Potential $\tilde{V}(z)$) gelöst. Für $v_1(z)$ macht man den üblichen Ansatz

$$v_1(z) = \begin{cases} \alpha e^{\gamma_2 z} + \beta e^{-\gamma_2 z} & -l_2 < z < -l_1 \\ \delta e^{i\gamma_1 z} + \varepsilon e^{-i\gamma_1 z} & -l_1 < z < l_1 \\ \tilde{\alpha} e^{\gamma_2 z} + \tilde{\beta} e^{-\gamma_2 z} & l_1 < z < l_2 \end{cases} \quad (1.34)$$

mit $\gamma_1 = (k^2 + \tau_1^2/4)^{1/2}$, $\gamma_2 = (-(k^2 + \tau_2^2/4))^{1/2}$.

Aus den Randbedingungen (1.29) (mit $a(k) = 0$), d.h.

$$\begin{aligned} v_1(-l_2) &= e^{ikl_2}, & v_1(l_2) &= 0 \\ v_2(-l_2) &= 0 \end{aligned} \quad (1.35)$$

sowie der Forderung nach Stetigkeit der Funktionen v_1, v_2 bei $z = \pm l_1$ (also insgesamt sieben Gleichungen) ergeben sich die sechs unbekannten Koeffizienten sowie die diskreten Eigenwerte k (die Anschlußbedingung $v_2(l_2) = b(k) e^{ikl_2}$ legt lediglich $b(k)$ fest). Die relevante Bedingung, aus denen sich k ergibt, lautet

$$\begin{aligned} 0 &= \cos(2\gamma_1 l_1) \left\{ \gamma_1 \gamma_2^2 - 2 i k \gamma_1 \gamma_2 \cdot \coth \beta + \gamma_1 \gamma_2^2 \coth^2 \beta \right\} \\ &+ i \sin(2\gamma_1 l_1) \left\{ k^3 + k \left(\frac{\tau_1 \tau_2}{2} - \frac{\tau_2^2}{4} \right) \right. \\ &\left. + 2 \left(k^2 + \frac{\tau_1 \tau_2}{4} \right) i \gamma_2 \coth \beta - k \gamma_2^2 \coth^2 \beta \right\} \end{aligned} \quad (1.36)$$

wobei $\beta = \gamma_2 (l_2 - l_1)$.

Als Test für diese Gleichung kann man ein reines Rechteckprofil für das Zusatzfeld wählen, also $B_{e,1} = B_{e,2}$, so wie es Kaup (1975) betrachtet hat. Daraus folgt $\tau_1 = \tau_2 = \tau$ sowie $\gamma_2 = i \gamma_1 = i \gamma$. Wir wählen speziell $\ell_2 = 2 \ell_1 = \ell$. Dann ergibt sich dieselbe Bedingung wie bei Kaup (Gl. (4.6) in seiner Arbeit), nämlich

$$i k = \gamma \cot 2 \ell \gamma, \quad \gamma = (k^2 + \tau^2/4)^{1/2}. \quad (1.37)$$

Bei einem Rechteckprofil hat man allerdings nicht mehr die Freiheit, $\ell \rightarrow \infty$ gehen zu lassen, da dies einer homogenen Anregung aller Spins entsprechen würde. Auf der anderen Seite müssen wir aber (wie oben dargestellt) der experimentellen Situation Rechnung tragen, daß sich das Magnetfeld über die Kettenenden hinaus erstreckt. Bei dem von uns untersuchten Stufenprofil von $B_e(z)$ kann man dies simulieren, indem man $\ell_2 \gg 1$ (und damit $\ell_2 \gg \ell_1$) annimmt. Dann kann ℓ_2 aus der Bedingung (1.36) eliminiert werden, da $\gamma_2 \coth \beta = \gamma_2 \coth \gamma_2 (\ell_2 - \ell_1) \rightarrow \gamma_2$ für $\ell_2 - \ell_1 \gg 1$. (Für $\gamma_2 \rightarrow 0$ verschwindet dieser Term, wie es sein sollte, denn

$$\lim_{\gamma_2 \rightarrow 0} \gamma_2 \coth \beta = \frac{1}{\ell_2 - \ell_1} \rightarrow 0 \quad \text{für } \ell_2 \gg \ell_1 .)$$

Mit dieser Approximation läßt sich $\kappa = -i k$ aus der sehr viel einfacheren Gleichung

$$\kappa = \left[\cot (2\gamma_1 \ell_1) (\gamma_1 \gamma_2^2 + \kappa \gamma_1 \gamma_2) + \kappa^3 + \gamma_2 \left(\kappa^2 - \frac{\tau_1 \tau_2}{4} \right) \right] \left(\frac{\tau_1 \tau_2}{4} \right)^{-1} \quad (1.38)$$

bestimmen. Die Zahl der uns interessierenden Lösungen mit $\frac{1}{2} < \kappa < \frac{\tau_1}{2}$ (es gibt Soliton-Antisoliton Paare nur für $\kappa > \frac{1}{2}$ und $\kappa < \tau_1/2$ ist durch die Tiefe des Potentialtopfs festgelegt) ist mindestens so groß wie die Zahl der Pole, N , der Funktion $\cot 2 \gamma_1 \ell_1$ im Bereich $0 < \gamma_1 < \frac{1}{2} (\tau_1^2 - 1)^{1/2}$ (diese Grenzen für γ_1 folgen aus denen für κ). Die Polstellen sind gegeben durch $2 \gamma_1 \ell_1 = n \pi$, und damit erhält man

$$N = [\ell_1 \pi^{-1} (\tau_1^2 - 1)^{1/2}] \quad (1.39)$$

(die eckigen Klammern stellen Gaußklammern dar, geben also den ganzzahligen Teil des eingeklammerten Ausdrucks wieder).

N gibt die Zahl der Soliton-Antisoliton Paare wieder, die sich im Gesamtsystem (physikalisches System plus Spiegelbild) aus der Anfangskonfiguration (1.26) heraus entwickeln. Über die Zuordnung der teilchenartigen Lösungen zu den Eigenwerten hinaus erlaubt die inverse Streutheorie aber noch weitere Aussagen: Im physikalischen System ($z > 0$) treten nur Antisolitonen auf (dies folgt aus dem Residuum von $b(k)/a(k)$ an den Nullstellen von $a(k)$; dazu muß man auch $a(k)$ ermitteln, also das Streuproblem (1.27) für alle k lösen), die sich mit einer (vom Wert von κ abhängigen) Geschwindigkeit

$$v_A = \frac{1 - 4 R_2^2}{1 + 4 R_2^2} \quad (1.40a)$$

nach rechts bewegen (R_2 aus Gl. (1.33b)). Solitonen erscheinen nur im Spiegelsystem und laufen (mit der betragsmäßig gleichen) Geschwindigkeit

$$v_S = \frac{1 - 4 R_1^2}{1 + 4 R_1^2} \quad (1.40b)$$

nach links ($|v_S| = v_A$, da $R_1 R_2 = 1/4$, wie man der quadratischen Gl. (1.33b) entnimmt). Dies liegt daran, daß das zusätzliche Feld einen bevorzugten Drehsinn ($\dot{\phi}(z,0) > 0$) in das System einführt. Mit der Richtung des Zusatzfeldes ($-B_e \vec{e}_z \rightarrow B_e \vec{e}_z$, entsprechend $\tau_i \rightarrow -\tau_i$) würde man auch obige Verhältnisse umkehren (Solitonen im physikalischen System, die sich nach rechts bewegen, etc.). Die Eigenwerte des Streuproblems bleiben davon unberührt, da Gl. (1.27a) invariant ist gegen die Transformation $\tau_i \rightarrow -\tau_i$. Dies liegt daran, daß τ_i nur quadratisch in das Potential $V(z)$ eingeht (Gl. (1.28)). Entsprechend müssen die Koeffizienten von $v_1(z)$ (Gl. (1.34)) unabhängig von dem Vorzeichenwechsel sein. Dies ist auch anschaulich klar, da nur die Stärke des Anfangsimpulses dafür ausschlaggebend sein darf, wieviele Soliton-Antisoliton Paare erzeugt werden. Da über Gl. (1.27b) τ_i

aber direkt in $v_2(z)$ eingeht, gilt dies auch für den Streukoeffizienten $b(k)$. Er ändert also sein Vorzeichen (in Gegensatz zu $a(k)$ aus $v_1(z)$). Damit folgt aus den veränderten Vorzeichen des Residuums von $b(k)/a(k)$ gerade die beschriebene Umkehrung der Verhältnisse.

1.4 Einfache Abschätzungen

Wir haben gezeigt, daß Soliton-Antisoliton Paare entstehen, sobald das direkte Streuproblem Eigenwerte $k = i \kappa$ mit $\kappa > \frac{1}{2}$ zuläßt. Da auf jeden Fall $\kappa < \tau_1/2$, muß $\tau_1 > 1$. Aus der in Gl. (1.26) definierten Verknüpfung von τ und dem zusätzlichen Magnetfeld erhält man für dieses die Bedingung

$$\frac{g \mu_B B_{e,1}}{\hbar \omega_0} \geq 2 \quad . \quad (1.41)$$

Die untere Grenze hat eine sehr anschauliche Erklärung: Ein einzelner Spin erreicht durch einen Anfangsimpuls $\dot{\varphi}(0)$ mit obiger Stärke (s. Gl. (1.12)) gerade die energetisch ungünstigste Stellung $\varphi = \pi$ (diese Auslenkung ist natürlich unbedingt erforderlich, damit ein Soliton entstehen kann). Dies soll im folgenden skizziert werden. Wir greifen dazu auf den Hamiltonian (1.8) zurück, in dem jetzt allerdings die Integration und der Kopplungsterm entfallen. Die klassische Darstellung des Spins sowie die Näherung $|\theta| \ll 1$ führen zu

$$H_S = A S^2 \theta^2 + g \mu_B B S (1 - \cos \varphi) + g \mu_B B_e(t) S \theta \quad . \quad (1.42)$$

Für $t < 0$ ist $B_e(t) \equiv 0$, und für $\theta = \varphi = 0$ (Grundzustand) ist $H_S \equiv 0$. Schaltet man das Zusatzfeld ein, ist $\theta = 0$ aber nicht mehr die energetisch günstigste Lage, sondern $\bar{\theta} = -g \mu_B B_e/2 A S$, wie aus der Minimalisierung von H_S bezüglich θ folgt. Der Spin besitzt mit $H_S = 0$ jetzt also potentielle Energie, denn das neue Energieminimum ist durch

$\bar{H}_S = - (g \mu_B B_e)^2 / 4 A$ gegeben. Die Energiebilanz für $t > 0$ lautet

$$AS^2 \left(\theta + \frac{g \mu_B B_e}{2 AS} \right)^2 - \frac{(g \mu_B B_e)^2}{4 A} + g \mu_B BS (1 - \cos \varphi) = 0 \quad (1.43)$$

und damit

$$\frac{(g \mu_B B_e)^2}{4 A^2 S^2} - \frac{g \mu_B BS (1 - \cos \varphi)}{A S^2} = \left(\theta + \frac{g \mu_B B_e}{2 AS} \right)^2 \geq 0 \quad (1.44)$$

Damit der Winkel $\varphi = \pi$ erreicht werden kann, muß

$$\frac{(g \mu_B B_e)^2}{4 A^2 S^2} - 2 \frac{g \mu_B B}{AS} \geq 0 \quad (1.45)$$

und daraus folgt die Bedingung (1.41):

$$\frac{g \mu_B B_e}{\sqrt{2} A g \mu_B BS} = \frac{g \mu_B B_e}{\hbar \omega_0} \geq 2 \quad (1.46)$$

Für ein System gekoppelter Spins liefert Gl. (1.46) die untere (notwendige) Schranke für die Stärke des Magnetfeldes.

Man erhält die Bedingung an B_e auch aus den Bewegungsgleichungen für einen einzelnen Spin. Die Dynamik in der Ebene leichter Magnetisierung wird beschrieben durch

$$\frac{d^2 \varphi}{dt^2} + \omega_0^2 \sin \varphi = 0 \quad (1.47)$$

(die Ortsableitung aus Gl. (1.5) ist weggefallen).

Setzt man $\varphi = \tilde{\varphi} - \pi$, ergibt sich

$$\frac{d^2 \tilde{\varphi}}{dt^2} - \omega_0^2 \sin \tilde{\varphi} = 0 \quad (1.48)$$

Die Lösung dieser Gleichung ist bekannt (ersetzt man die Zeit durch den Ort, so erhält man gerade die Gleichung für ein stationäres Soliton oder Antisoliton):

$$\tilde{\varphi}(t) = 4 \arctan e^{\pm \omega_0 t} . \quad (1.49)$$

Sie beschreibt die einmalige Rotation des Spins von $\varphi(t \rightarrow -\infty) = -\pi$ bis $\varphi(t \rightarrow \infty) = \pi$. Für unsere Fragestellung ausschlaggebend sind aber nur die Bedingungen bei $t = 0$:

$$\begin{aligned} \varphi(0) &= 0 \\ \frac{d\varphi(0)}{dt} &= \frac{d\tilde{\varphi}(0)}{dt} = \mp 2 \omega_0 . \end{aligned} \quad (1.50)$$

Diesen Anfangswert geben wir durch das (plötzliche) Einschalten des zusätzlichen Magnetfeldes vor. Aus der auch für einen einzelnen Spin gültigen Gl. (1.9) folgt andererseits mit $\theta = 0$ (der Spin soll sich ja für $t < 0$ im Grundzustand $\varphi = 0$, $\theta = 0$ befinden)

$$\frac{d\varphi(0)}{dt} = \mp \frac{g \mu_B B_e}{\hbar} \quad (1.51)$$

(Vorzeichen je nach Feldrichtung) .

Vergleich von (1.50) und (1.51) liefert wieder die gesuchte Bedingung an das Magnetfeld.

Es sei an dieser Stelle noch einmal erwähnt, daß der Spin durch das Einschalten des Zusatzfeldes potentielle Energie gewinnt, die in eine Präzessionsbewegung ($\dot{\varphi}(0) > 0$) umgesetzt wird. Anders als bei einer Kette elastisch gekoppelter Pendel im Schwerfeld, deren (streng planare!) Dynamik ebenfalls durch die sine-Gordon Gleichung beschrieben wird, wird in einem Spinsystem ja keine kinetische Energie definiert. Über Gl. (1.4a) kann man aber den Anisotropieterm im Hamiltonian (1.3) derart umschreiben, daß er wie die kinetische Energie aussieht:

$$AS^2 \theta^2 = \frac{1}{2} \left(\frac{\hbar^2}{2A} \right) \dot{\varphi}^2 \quad (1.52)$$

Anschaulich ist dies so zu verstehen, daß die Anisotropie den Spin - falls er aus der leichten Ebene herauskommt - stets in diese zurückbringen will. Das so ausgeübte Drehmoment führt zu der Präzessionsbewegung in φ . Es wird auch deutlich, daß nur bei einer endlichen S_z -Komponente ($\theta \neq 0$) eine nichtstatische Konfiguration entstehen kann, was man explizit durch die Gestalt der laufenden Lösungen (Gl. (1.7)) bestätigt findet. Dies erklärt auch, wieso in der Bedingung (1.46) an das zusätzliche Magnetfeld die Anisotropie auftritt: Auch die Bewegung eines einzelnen Spins ist mit einer endlichen S_z -Komponente verbunden, die man wegen des Zusatzfeldes jetzt über (1.9) erhält (mit $\varphi(t)$ aus Gl. (1.49))

$$\theta = \mp \frac{\hbar \omega_0}{2 AS} \frac{2}{\cosh \omega_0 t} \mp \frac{g \mu_B B_e}{2 AS} \quad . \quad (1.53)$$

Für $t \rightarrow \infty$ strebt θ schon dem erwähnten neuen Gleichgewichtswert $\mp g \mu_B B_e / (2 AS)$ zu.

Abschließend soll zum System der gekoppelten Spins zurückgekehrt und die Energiebilanz für die Erzeugung von N Antisolitonen aufgestellt werden. Mit der in Gl. (1.43) durchgeführten Umformung ergibt sich für den in (1.8) definierten Hamiltonian

$$\begin{aligned} \tilde{H} = \int \frac{dz}{a} \left\{ \frac{1}{2} J a^2 S^2 \left(\frac{\partial \varphi}{\partial z} \right)^2 + AS^2 \left[\theta + \frac{g \mu_B B_e(z,t)}{2 AS} \right]^2 \right. \\ \left. - \frac{(g \mu_B B_e(z,t))^2}{4A} + g \mu_B BS (1 - \cos \varphi) \right\} \quad . \end{aligned} \quad (1.54)$$

Der Winkel θ wird über Gl. (1.9) eliminiert:

$$\begin{aligned} \tilde{H} = \int \frac{dz}{a} \left\{ \frac{1}{2} J a^2 S^2 \left(\frac{\partial \varphi}{\partial z} \right)^2 + \frac{\hbar^2}{4A} \left(\frac{\partial \varphi}{\partial t} \right)^2 + g \mu_B BS (1 - \cos \varphi) \right. \\ \left. - \frac{(g \mu_B B_e(z,t))^2}{4A} \right\} \quad . \end{aligned} \quad (1.55)$$

Die ersten drei Summanden repräsentieren den sine-Gorden Hamiltonian. Der Einfachheit halber soll er durch $N E_0$ ersetzt werden, wobei $E_0 = 8S (J g \mu_B B S)^{1/2}$ die Ruheenergie

eines (Anti)Solitons darstellt. In der Energiebilanz für $t > 0$ ($\tilde{H} \equiv 0$ für $t < 0$) muß dann allerdings das Gleichheitszeichen ausgetauscht werden, da ja auch Energie für die Bewegung der Solitonen sowie für andere Anregungen aufgebracht werden muß:

$$N E_0 < \int \frac{dz}{a} \frac{(g \mu_B B_e(z))^2}{4A} . \quad (1.56)$$

Mit dem Stufenprofil von $B_e(z)$ kann das Integral leicht ausgewertet werden. Verwendet man noch die Definition von τ aus Gl. (1.26), so liest sich die Bilanz

$$N E_0 < \frac{1}{4} E_0 \left\{ \tau_1^2 \ell_1 + \tau_2^2 \left(z_B^{-\ell_1} \right) \right\} . \quad (1.57)$$

Da Solitonen nur aus dem Bereich $B_e(z) \sim \tau_1$ kommen, kann für diese Abschätzung der zweite Term auf der rechten Seite entfallen. Man sieht, daß nicht nur eine bestimmte Stärke des Magnetfeldes notwendig ist (τ_1 muß größer als eins sein, wie gezeigt wurde), sondern daß diese Anregung auch über einen bestimmten Bereich wirksam sein muß ($\ell_1 \tau_1^2/4$ ist gerade das Produkt aus Breite und Tiefe des im direkten Streuproblem verwendeten Potentialtopfs). Mit N aus Gl. (1.39) ist die Ungleichung (1.57) stets erfüllt.

1.5 Diskussion der Ergebnisse

Wir haben gezeigt, daß es prinzipiell möglich ist, nichtthermische Solitonen durch ein zusätzliches, parallel zur Kettenrichtung angelegtes Magnetfeld zu erzeugen, wenn sowohl das Feld selbst ($\tau_1 > 1$) als auch sein Gradient (Abfall von τ_1 nach τ_2 längs ℓ_1) hinreichend groß sind. In diesem Abschnitt sollen die Einschränkungen diskutiert werden, denen diese Aussage unterworfen ist, sowie mögliche Auswege.

Zum einen ist man mit einer Frage konfrontiert, die mit der Stärke sowie dem zeitlichen Verlauf des Zusatzfeldes zusammenhängt, nämlich inwieweit die Abbildung des Problems auf ein Anfangswertproblem für das sine-Gordon System gerechtfertigt ist. Über die üblichen (für die Reduktion des Ausgangshamiltonian (1.1) auf die Form (1.3) notwendigen) Annahmen hinaus mußten ja drei Bedingungen gestellt werden: i) Auch in Anwesenheit des zusätzlichen Magnetfeldes müssen die S_z -Komponenten klein bleiben. ii) Das Magnetfeld muß plötzlich eingeschaltet werden (approximiert durch die Stufenfunktion in der Zeit). iii) Die thermischen Fluktuationen werden vernachlässigt. Im folgenden werden diese Voraussetzungen detailliert untersucht.

- 1) Um die Konsistenz der Annahme $|\theta| \ll 1$ zu prüfen, berechnet man θ über Gl. (1.9):

$$\theta = \left(\frac{g \mu_B B}{2 AS} \right)^{1/2} \gamma \left(\frac{v}{c_0} \right) \frac{2}{\cosh(\gamma(z-vt)/d_0)} - \frac{g \mu_B B_e(z)}{2 AS}$$

(Vorzeichen für Antisolitonen und $\vec{B}_e = -B_e \vec{e}_z$) .

Nimmt man die Parameter von CsNiF_3 , so ist $B_{e,1} = 17.3 \text{ KG}$ (bei $B = 1 \text{ KG}$) erforderlich, damit $\tau_1 = 1.1$. Der entsprechende Gleichgewichtswinkel $\bar{\theta} = -g \mu_B B_{e,1} / 2 AS = -0.32$ wird teilweise kompensiert durch den (betragsmäßig kleineren) dynamischen (von v abhängigen) Anteil in θ : für $v < 0.42 c_0$ liefert dieser Term den Maximalwert 0.19 . (Die Beschränkung der Geschwindigkeit ergibt sich aus der oberen Schranke für κ : Wegen $\kappa \leq \tau_1/2$ wurde zur Ermittlung der maximal möglichen Geschwindigkeit $\kappa = 0.55$ verwendet.)

Im Vorgriff auf die Ergebnisse der beiden noch folgenden Kapitel läßt sich feststellen: Die angegebene maximale Geschwindigkeit liegt (für $B = 1 \text{ KG}$) noch in dem Bereich der Dispersion der nichtlinearen Anregungen, die - trotz deutlicher Abweichungen - mit den sine-Gordon Solitonen verknüpft sind, und zwar sowohl ohne Zusatzfeld (Kap. 2) als auch in Anwesenheit desselben (Kap. 3). Die (Quasi-)

Teilchen, die sich aus der von uns betrachteten Anfangskonfiguration herauslösen, gehören nämlich zu denjenigen, deren "sine-Gordon" Zweig der Dispersionsrelation bei Anlegen des Zusatzfeldes zu höheren Geschwindigkeiten hin erweitert wird (dies liegt an der teilweisen Kompensation des statischen und dynamischen Anteils in Θ). Insgesamt kann man davon ausgehen, daß der durch das Einschalten des Zusatzfeldes vermittelte Anfangsimpuls (die beginnende Präzession) zu einer Produktion nichtlinearer Anregung führt, die mit den sine-Gordon Solitonen deren teilchenartigen Charakter (endliche Ruheenergie, räumliche Lokalisation) teilen.

- 2) Damit ist das zweite Problem angesprochen worden, nämlich inwieweit das vorausgesetzte zeitliche Verhalten des Zusatzfeldes experimentell verwirklicht werden kann. Damit verbunden ist natürlich die Frage nach der relevanten Zeitskala (was heißt 'plötzlich einschalten'). Die sine-Gordon Gleichung definiert über $t_0 = 1/\omega_0$ zunächst eine sehr kurze Zeitskala ($t_0 \sim 6 \cdot 10^{-12}$ s in CsNiF_3 für $B = 1$ KG), auf der kein Magnetfeld mit der notwendigen Stärke schnell variiert werden kann (Benner, private Mitteilung). Fragt man dagegen nach der Zeit t_1 , die eine Anregung braucht, um den Bereich mit $B_e > \tau_1$ zu verlassen, so gelangt man zur Abschätzung $t_1 \geq \ell_1 t_0$ (das Gleichheitszeichen gilt für $v = c_0$). Wie sehr sich t_1 von t_0 unterscheidet, hängt jetzt von ℓ_1 (der Ausdehnung des Bereichs, in Einheiten von d_0) ab. Dies wird noch bei der Diskussion um den Gradienten aufgegriffen. Im Augenblick scheint eine befriedigende Klärung der Frage nur durch eine Computersimulation möglich.
- 3) Bei der Herleitung des Anfangswertproblems mußten die thermischen Fluktuationen vernachlässigt werden, da nur ein rein deterministisches Problem durch die inverse Streutheorie gelöst werden kann. Und wir waren auch daran interessiert, nichtthermische Solitonen durch einen gut kontrollierbaren Mechanismus zu produzieren. Thermische Fluktuationen sind darüber hinaus kein Hinderungsgrund

für die Entstehung nichtlinearer Anregungen: Zum einen sind sie für die thermisch aktivierten Soliton-Antisoliton Paare verantwortlich, die bislang im Experiment beobachtet werden konnten, zum anderen konnten Büttiker und Landauer (1980, 1982) eine Nukleationstheorie für Soliton-Antisoliton Paare für die (durch eine äußere Kraft) getriebene sine-Gordon Kette aufstellen, wobei Dämpfung und die Ankopplung an ein Wärmebad in die Beschreibung einbezogen werden. Den Anschluß an diese Theorie kann man über Gl. (1.10) herstellen (Hackenbracht 1982), indem man für das zusätzliche Magnetfeld einen zeitlich linearen Anstieg annimmt. Eine räumliche Inhomogenität des Feldes ist nicht nötig, da sie bereits intrinsisch durch die Fluktuationen herbeigeführt wird. Allerdings findet man, daß mit den Parametern für CsNiF_3 die Stärke der treibenden Kraft sehr klein ist. Dies liegt vor allem daran, daß der zeitliche Anstieg von B_e nicht sehr groß sein darf, da das Experiment über sehr lange Zeit (Steiner, private Mitteilung) durchgeführt werden muß und es somit (da $\dot{B}_e = \text{const}$) sonst zu unzulässig hohen Feldstärken käme. Damit sind die Probleme, die mit der hinreichenden Stärke des Zusatzfeldes zusammenhängen, dargestellt und wir können die Schwierigkeiten bei der experimentellen Realisierung des notwendigen Gradienten diskutieren.

Bei den Rechnungen haben wir vorausgesetzt, daß das Feld B_e längs einer Kette von einem für die Solitonproduktion hinreichenden Wert ($\tau_1 > 1$) zu einem unterkritischen Wert ($\tau_2 < 1$) abfällt. Genauer gesagt sollte dies auf einer Länge $l_1 \ll l$ (l die Länge der Kette) geschehen. Wenn man die Verhältnisse entlang einer einzelnen Kette passend einrichtet, so wird der Bereich, der eine Erzeugung der nichtthermischen Anregungen zuläßt, sehr klein im Vergleich zur (linearen) Ausdehnung L der Probe. Die Zahl der zusätzlich auftretenden Solitonen, N , ist aber nur dann vergleichbar mit der Zahl der thermisch aktivierten, N_T , wenn l_1 einige mm lang ist (Tab. 1.1). Mit einer einzelnen Kette ist dies aber nicht zu verwirklichen: in CsNiF_3 sind Kettenlängen von maximal einigen 100 Gitterkonstanten, also weniger als $0,1 \mu\text{m}$, realisierbar (Steiner, Benner, private Mitteilung).

Tabelle 1.1 Zahl der nichtthermischen, N , und der thermischen, N_T , Solitonen

B	$B_{e,1}$	$B_{e,2}$	ℓ_1, d_0	N	N_T (5 K)
[KG]	[KG]	[KG]	[mm]		
1	17.3	14.2	5	$2.4 \cdot 10^5$	$4.1 \cdot 10^5$
			1	$4.7 \cdot 10^4$	
2	24.5	20.1	5	$3.3 \cdot 10^5$	$2.3 \cdot 10^5$
			1	$6.6 \cdot 10^4$	

Außerdem sind selbst bei diesen langen Ketten die auftretenden Gradienten (approximiert durch $(B_{e,1} - B_{e,2})/\ell_1$) sehr groß. Zur Tabelle sei bemerkt, daß der Wert von $B_{e,1}$ stets einem $\tau_1 = 1.1$, der von $B_{e,2}$ einem $\tau_2 = 0.9$ entspricht. Die Zahl der thermisch aktivierten Solitonen (und Antisolitonen) wurde über $N_T = n_T \cdot L$ berechnet. n_T ist die Dichte dieser nichtlinearen Anregungen (Trullinger 1980, s. auch Kap. 3.4), für L wurde (um ein Zahlenbeispiel zu haben) 1 cm gewählt.

Mögliche Auswege aus den eben geschilderten Schwierigkeiten sind über intrinsische Inhomogenitäten zu suchen. Am wirkungsvollsten erscheint eine lokale Verringerung des symmetriebrechenden Feldes B , z.B. durch magnetische Verunreinigungen zwischen den Ketten (Cs müßte entsprechend ersetzt werden), weil dann weniger Energie notwendig ist, einen Spin gegen das Feld B zu verdrehen. Magnetische Verunreinigungen innerhalb der Kette können zu einer Verringerung der Austauschkopplung J führen. Schöbinger (1983a,b) hat gezeigt, daß ein Soliton an einer solchen Störstelle sogar auseinanderbrechen kann. Umgekehrt ist es vorstellbar, daß an diesen Stellen auch eine leichtere 'Verdrillung' der Spins (und damit Erzeugung der Solitonen) möglich ist. Allerdings setzt dies immer noch eine inhomogene Anregung voraus, denn die Kopplung wird nur dann bemerkbar, wenn sich benachbarte Spins unterschiedlich bewegen. Möglich erscheint auch, Oberflächeneffekte

auszunutzen. Und schließlich stellen - wie schon erwähnt - thermische Fluktuationen räumliche Inhomogenitäten dar. Außerdem ist der verlangte Abfall des Magnetfeldes längs einer Kette zunächst eine mathematische Forderung gewesen. Wenn man sich die folgende anschauliche Erklärung zur Entstehung der (Anti)Solitonen aus der Anfangskonfiguration vor Augen hält, erscheint es möglich, daß auch ein kleinerer Gradient zu einer Erzeugung dieser Anregungen führt: Das erste Antisoliton entsteht im Bereich um die Diskontinuität bei l_1 , da die Spins an den Orten $z_i < l_1$ einen größeren Anfangsimpuls erhalten als diejenigen mit $z_i > l_1$. Die Kopplung bewirkt, daß die äußeren ($l_1 - d_0 \lesssim z \lesssim l_1$) schnelleren Spins Energie an ihre langsameren Nachbarn abgeben müssen, wohingegen die inneren Spins noch ungehindert weiter präzedieren. Durch das Auftreten des Antisolitons ist der ursprünglich homogene Bereich ($z < l_1$) jetzt aber selbst inhomogen geworden. Dies führt (nacheinander) zur Ablösung weiterer Antisolitonen.

Insgesamt erscheint die kontrollierte Erzeugung nichtthermischer Solitonen als eine mögliche Methode zur Unterstützung der Interpretation der bisherigen Experimente, die im Rahmen eines speziellen Modells teilchenartiger nichtlinearer Anregungen - nämlich des sine-Gordon Bildes - erfolgt.

2. ERWEITERTES SOLITONENBAND IN PLANAREN FERROMAGNETEN

2.1 Die vollständigen Bewegungsgleichungen

Wie schon im ersten Kapitel mehrfach erwähnt, ist die Beschreibung der Spindynamik des realen Systems durch die sine-Gordon Gleichung an die Voraussetzung geknüpft, daß die Bewegung aus der leichten Ebene heraus stark unterdrückt wird. Auf der anderen Seite ist jede laufende Lösung der (genäherten) Bewegungsgleichungen (1.4) zwingend mit einer S_z -Komponente verbunden. Im Gegensatz zu der streng planaren Dynamik eines idealen sine-Gordon Systems steht den Spins in realen Magneten ja die dritte Dimension zur Verfügung. Dies hat zur Konsequenz, daß schon bei kleinen Magnetfeldern und Geschwindigkeiten deutliche Abweichungen vom sine-Gordon Bild auftreten (Magyari und Thomas 1982, Kumar 1982, Wysin et al. 1982). Wir werden im folgenden eine variationsmäßige Lösung der vollständigen Bewegungsgleichung vorstellen, wobei der Variationsansatz erstmals eine kontinuierliche Deformation des planaren sine-Gordon Solitons bis hin zu nichtlinearen Anregungen kleiner Amplitude gestattet. Dieses Verschwinden des Solitons steht nicht im Widerspruch zum topologischen Erhaltungssatz des sine-Gordon Systems, sondern wird durch ein Umklappen der Spins (zunehmende S_z -Komponente) ermöglicht. Die Variationsrechnung wird außerdem durch eine Computersimulation bestätigt und ergänzt. Mit unseren Untersuchungen (Liebmann, Schöbinger, Hakenbracht 1983) konnten wir außerdem zwei wesentliche Fragen klären:

- 1) Alle auftretenden Lösungen sind dynamisch stabil.
- 2) Es gibt einen Zweig in der Dispersionskurve, dessen Lösungen mit den sine-Gordon Solitonen zusammenhängen. Eine Deutung der Experimente in diesem Bild ist daher trotz der substantiellen Abweichungen zulässig.

Ausgangspunkt der Analyse ist der Hamiltonian (1.1), wobei es allerdings zweckmäßig ist, die Einheiten von Magyari und Thomas (1982) zu übernehmen.

$$H = \epsilon_0 \frac{a}{\delta_0} \sum_i \left\{ - \left(\frac{\delta_0}{a} \right)^2 \vec{s}_i \cdot \vec{s}_{i+1} + \frac{1}{2} s_{i,z}^2 - b s_{i,x} \right\} \quad (2.1)$$

Energie-, Längen- und Zeitskala sind durch $\epsilon_0 = S^2 (2AJ)^{1/2}$, $\delta_0 = a (J/2A)^{1/2}$ und $\tau_0 = \hbar/2AS$ gesetzt, $\vec{s} = \vec{S}/S$. Gibt man alle Größen in diesen Einheiten an, so verbleibt als einziger relevanter Parameter $b = g \mu_B B/2AS$ (der uns schon in Gl. (1.7) als Vorfaktor begegnet ist). Er wird gern als das Verhältnis des symmetriebrechenden Feldes B zu dem sogenannten Anisotropiefeld $B_A = 2 AS/g\mu_B$ (54 KG für CsNiF_3) interpretiert. Die aus dem vorhergehenden Kapitel bekannten Dimensionierungen gewinnt man über $E_0 = 8 b^{1/2} \epsilon_0$ (Ruheenergie eines Solitons), $d_0 = \delta_0 b^{-1/2}$, $1/\omega_0 = \tau_0 b^{1/2}$, $c_0 = d_0 \omega_0 = \delta_0/\tau_0$ zurück. Die exakte Dynamik eines Spins ist durch die Landau-Lifschitz Gleichung gegeben

$$\dot{\vec{s}}_i = - \vec{s}_i \times \vec{H}_{\text{eff},i} \quad ; \quad \vec{H}_{\text{eff},i} = \frac{\partial H}{\partial \vec{s}_i} \quad (2.2)$$

Sie beschreibt die Präzession der Spins in dem effektiven Magnetfeld $\vec{H}_{\text{eff}}$. Die Gl. (2.2) ist für eine numerische Behandlung wegen ihrer diskreten Form gut geeignet. Für eine analytische Untersuchung bietet sich wieder die Kontinuumsversion an: (Punkt und Strich stellen wieder Zeit- und Ortsableitung dar, jetzt allerdings in den neuen Einheiten!)

$$\begin{aligned} \vec{s}_i &\rightarrow \vec{s}(z) \\ H &\rightarrow E[s(\vec{z})] = \int dz \left\{ \frac{1}{2} (\vec{s}')^2 + \frac{1}{2} s_z^2 + b (1-s_x) \right\} \\ \dot{\vec{s}} &= \vec{s} \times \left(\vec{s}'' - s_z \vec{e}_z + b \vec{e}_x \right) \quad (2.3) \end{aligned}$$

Die Grundzustandsenergie wurde in $E[\vec{s}]$ wieder abgezogen.

Obwohl wir in unserem Variationsansatz kartesische Koordinaten verwenden werden, da sich die Polarkoordinaten nur als beschränkt anwendbar erweisen, wird zunächst auf die bekannte Parametrisierung für den Spin $\vec{s} = \vec{s}(\theta, \varphi)$ (s. Gl. (1.2)) zurückgegriffen. Zum einen kann damit der Anschluß an die sine-Gordon Theorie hergestellt werden, zum anderen findet man in dieser Darstellung leichter das relevante Funktional K (s. unten). Die Bewegungsgleichungen lauten dann

$$\dot{s}_z = \dot{\theta} \cos \theta = (-2 \theta' \varphi' \sin \theta + \varphi'' \cos \theta - b \sin \varphi) \cos \theta \quad (2.4a)$$

$$\dot{\varphi} = -\frac{1}{\cos \theta} \left(\theta'' + \left\{ (\varphi')^2 - 1 \right\} \sin \theta \cos \theta - b \sin \theta \cos \varphi \right) \quad (2.4b)$$

und können wieder auf die Hamilton'sche Form

$$\dot{s}_z = -\frac{\delta E}{\delta \varphi} \quad (2.5a)$$

$$\dot{\varphi} = \frac{\delta E}{\delta s_z} = \frac{\delta E}{\delta \theta} \frac{1}{\cos \theta} \quad (2.5b)$$

gebracht werden, wenn man die Energie ebenfalls als Funktional der Winkel $\varphi(z)$, $\theta(z)$ auffaßt. Einsetzen von $\vec{s} = \vec{s}(\theta, \varphi)$ in Gl. (2.3) liefert die gewünschte Darstellung

$$E[\theta, \varphi] = \int dz \left\{ \frac{1}{2} [(\theta')^2 + (\varphi')^2 \cos^2 \theta + \sin^2 \theta] + b (1 - \cos \theta \cos \varphi) \right\} \quad (2.6)$$

Für $b \neq 0$ ist eine exakte Lösung der Gl. (2.4) bekannt, nämlich das statische, planare sine-Gordon Soliton ($\varphi = 4 \arctan \exp(zb^{1/2})$, $\theta \equiv 0$). (Für $b = 0$ und $\varphi \equiv 0$ erhält man eine exakte statische, nicht triviale Lösung für θ , nämlich ein sine-Gordon Soliton in der Variablen $\psi = 2\theta$). Näherungsweise (für $b \ll 1$ und $|\theta| \ll 1$) erhält man die schon bekannten Gln. (1.4) zurück, die nur wegen der neuen Skalierung hier noch einmal angegeben werden:

$$\dot{\varphi} = \Theta \quad (2.7a)$$

$$\dot{\Theta} = \varphi'' - b \sin \varphi \quad (2.7b)$$

mit der Kinklösung

$$\varphi_K(z,t) = 4 \arctan \exp \left\{ \gamma (z-ut)/b^{-1/2} \right\} \quad (2.8a)$$

$$\Theta_K(z,t) = \mp u \gamma b^{1/2} \frac{2}{\cosh \left\{ \gamma (z-ut)/b^{-1/2} \right\}} \quad (2.8b)$$

Im weiteren wichtig ist die Tatsache, daß diese Lösungen vom Typ 'laufende Welle', also von der Form $\vec{s}(z,t) = \vec{s}(z-ut)$ sind. Beschränkt man sich nur auf solche, so kann man in den Bewegungsgleichungen die Zeitableitung zugunsten der räumlichen eliminieren: $\frac{\partial}{\partial t} \rightarrow -u \frac{\partial}{\partial z}$ und erhält

$$0 = - \frac{\delta E}{\delta \varphi} + u (\sin \Theta)' \quad (2.9a)$$

$$0 = \frac{\delta E}{\delta \Theta} + u \varphi' \cos \Theta \quad (2.9b)$$

Diese Gleichungen kann man als Euler-Lagrange Gleichungen des Funktionals

$$K [\Theta, \varphi] = E [\Theta, \varphi] + u F [\Theta, \varphi] \quad (2.10)$$

erhalten, d.h. über die Extremalbedingungen

$$0 = \frac{\delta K}{\delta \varphi} \quad \text{und} \quad 0 = \frac{\delta K}{\delta \Theta} \quad , \quad (2.11)$$

wobei

$$F [\Theta, \varphi] = \int dz \left\{ \varphi' \sin \Theta \right\} \quad (2.12)$$

dem Impuls der Lösung entspricht.

K ist nichts anderes als der negative Lagrangian des Systems. Üblicherweise erhält man die Bewegungsgleichungen durch Extremalisierung der Wirkungsfunktion. Wegen der Beschränkung der Lösungen auf solche vom Typ $\vec{s}(z-ut)$, d.h. durch die

Elimination der Zeit als eigenständige Variable, reduziert sich die Aufgabe auf die Variation von K . Man kann die Problemstellung auch so ausdrücken, daß die Energie extremalisiert werden soll unter der Nebenbedingung eines konstanten Impulses (Tjon und Wright 1977) mit der Geschwindigkeit u als Lagrangeparameter. Die Darstellung als Variationsproblem hat den Vorteil, daß eine approximative Lösung jetzt mit Hilfe eines Variationsansatzes bestimmt werden kann. Da wir dabei kartesische Koordinaten verwenden werden, also

$\vec{s} = (s_x, s_y, s_z)$, soll die entsprechende Darstellung des Funktionals K hier noch erwähnt werden

$$K[\vec{s}] = E[\vec{s}] + u F[\vec{s}]$$

$$F[\vec{s}] = \int dz \left\{ s_z \frac{\partial}{\partial z} \arctan \left(\frac{s_y}{s_x} \right) \right\} \quad (2.13)$$

und $E[\vec{s}]$ wie in Gl. (2.3) gegeben.

2.2 Der Variationsansatz

Läuft ein Soliton die Spinkette entlang, so beschreibt im Laufe der Zeit jeder Spin dieselbe Trajektorie auf der Einheitskugel (die Spinlänge ist ja auf eins normiert). Diese muß geschlossen sein, d.h. bei $\vec{s}_0 = (1,0,0)$ anfangen und aufhören, da das Soliton eine lokalisierte Lösung ist und den Übergang vom Grundzustand ($\varphi = 0, \theta = 0$) zum entarteten (Nachbar)Vakuum ($\varphi = 2\pi, \theta = 0$) beschreibt. Die Charakterisierung der Lösung ist vollständig, wenn man noch die räumliche Verteilung der Spins längs der Trajektorie (also eine Momentaufnahme) angibt. Die meisten Spins werden natürlich in der Nähe von $\vec{s}_0$ sein. Wir benutzen einen zweiparametrischen Ansatz im kartesischen Koordinaten ($Z = z - ut$):

$$\begin{aligned}
 s_x(Z) &= 1 - c^2 \left(1 - \cos \psi(Z) \right) \\
 s_y(Z) &= c \sin \psi(Z) \\
 s_z(Z) &= c s \left(1 - \cos \psi(Z) \right) \\
 \psi(Z) &= 4 \arctan \exp (Z/\delta)
 \end{aligned}
 \tag{2.14}$$

mit $c = \cos (\theta_m/2)$, $s = \sin (\theta_m/2)$.

Dieser Ansatz beschreibt eine kreisförmige Trajektorie durch die Punkte $\vec{s}_0 = (1,0,0)$ und $\vec{s}_m = (-\cos \theta_m, 0, \sin \theta_m)$, der Solitonmitte. Der Winkel θ_m mißt die maximale Auslenkung eines Spins aus der x,y -Ebene heraus. ψ ist der Winkel in der Ebene, die durch die Trajektorie festgelegt wird, also in der Grundfläche des Kreiskegels, der von den Spinvektoren durchlaufen wird, gezählt vom Kreismittelpunkt aus. Die funktionale Abhängigkeit ist so gewählt, daß für $\theta_m = 0$ (ψ geht dann in den üblichen Winkel φ in der x,y -Ebene über) der statische planare sine-Gordon Grenzfall reproduziert wird. δ ist wieder ein Maß für die Ausdehnung des Solitons. In Fig. 2.1 sind drei

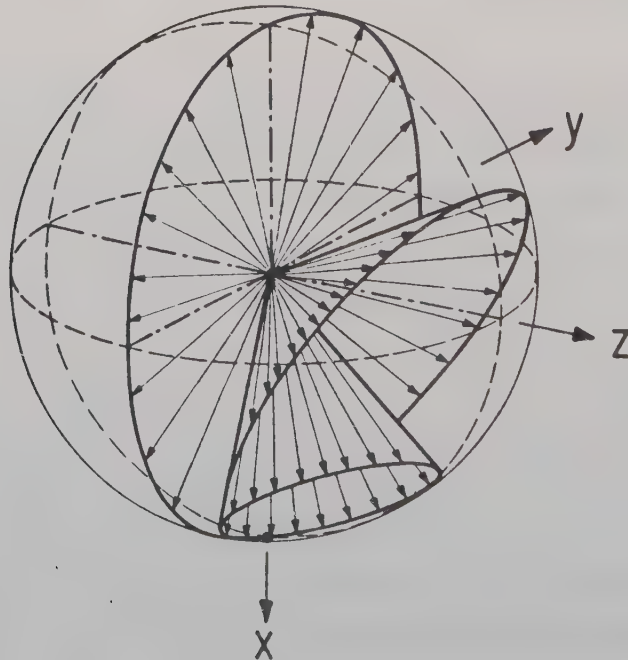


Fig. 2.1 Kreisförmige Trajektorien des Variationsansatzes für $\theta_m = 0$, 0.34π , 0.75π , die das 'folding of the umbrella' zeigen.

Trajektorien mit verschiedenem Θ_m dargestellt. Entscheidend ist, daß Θ_m nicht auf kleine Werte beschränkt bleibt, sondern sogar über $\pi/2$ (s_m parallel zur z-Achse) hinaus gehen kann. Für $\Theta_m \rightarrow \pi$ wird der Kreiskegel, den die Spinvektoren beschreiben, immer enger: man nähert sich dem Grenzfall nichtlinearer Anregungen kleiner Amplitude. Der eben beschriebene Übergang, anschaulich als 'folding of the umbrella' bezeichnet, stellt den topologischen Zerfall eines Solitons dar. Diese kontinuierliche Deformation kann nicht mit stetigen, in Polarkoordinaten parametrisierten Testfunktionen erzielt werden: bei $\Theta_m = \pi/2$ treten unphysikalische Spitzen auf (Fig. 2.2). Der Gültigkeitsbereich von Polarkoordinaten ist daher auf $\Theta_m < \pi/2$ beschränkt. Für $\Theta_m > \pi/2$ führen sie zu einem artifiziellen Energieminimum (Kumar 1982). Numerische Schwierigkeiten treten schon bei Annäherung an $\pi/2$ auf (Wysin et al. 1982).

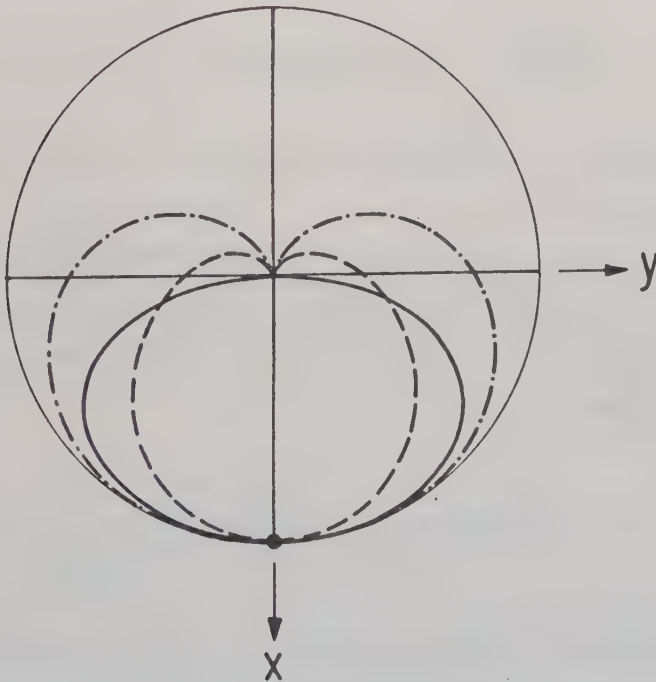


Fig. 2.2 Projektion der Trajektorie unseres Variationsansatzes für $\Theta_m = \pi/2$ auf die x,y-Ebene (—).

Die entsprechenden Kurven von Kumar (1982) (-.-.) und Magyari und Thomas (1982) (----) weisen Diskontinuitäten auf.

Mit diesem Ansatz kann das Funktional K (Gl. (2.13)) in eine Funktion der Variationsparameter Θ_m und δ überführt werden, wobei im Funktional F s_z durch $(s_z - 1)$ ersetzt wird, um eine unphysikalische Stufenfunktion zu eliminieren (dies läßt die Bewegungsgleichungen natürlich unverändert):

$$K(\Theta_m, \delta) = 4 c^2 \left\{ \frac{1}{\delta} + \delta \left(b + \frac{2}{3} s^2 \right) \right\} + u 2\pi (s-1) \quad (2.15)$$

Bei der Bestimmung der extremalisierenden Parameterwerte beginnt man mit der Gleichung für δ :

$$\frac{\partial K}{\partial \delta} = 0 \Rightarrow \delta = \delta(\Theta_m) = \left(b + \frac{2}{3} s^2 \right)^{-1/2} \quad (2.16)$$

Damit läßt sich K und insbesondere die Energie (der erste Summand in (2.15)) allein durch Θ_m ausdrücken:

$$E(\Theta_m) = 8 b^{1/2} c^2 (1 + 2 s^2 / 3b)^{1/2} \quad (2.17)$$

In Fig. 2.3 sind für verschiedene Werte des Magnetfeldes b die Energien als Funktion von Θ_m aufgetragen. Für festes b liegen alle möglichen Energien, die die von unserem Ansatz erfaßten nichtlinearen Anregungen aufweisen können, auf einer Kurve. Welche Energie realisiert wird, ergibt sich aus der jeweiligen Extremalgleichung

$$\frac{\partial K}{\partial \Theta_m} = 0 \Rightarrow u(\bar{\Theta}_m) = - \left(\frac{\partial E / \partial \Theta_m}{\partial F / \partial \Theta_m} \right)_{\Theta_m = \bar{\Theta}_m}, \quad (2.18)$$

wobei man nicht die Geschwindigkeit u , sondern Θ_m als unabhängige Variable ansieht. Eine Konfiguration mit vorgegebenem Winkel $\bar{\Theta}_m$ ist genau dann eine Lösung des Variationsproblems, wenn sie die Geschwindigkeit $u(\bar{\Theta}_m)$ gemäß (2.18) hat (der Parameter δ ist ja schon optimiert). Mit Hilfe dieser Relation kann die Energie auch als Funktion der Geschwindigkeit angegeben werden (Fig. 2.4). Da die Energie invariant ist gegenüber der Transformation $u \rightarrow -u$ (entsprechend $\Theta_m \rightarrow -\Theta_m$), sind Kurven mit $\Theta_m < 0$ nicht eingetragen.

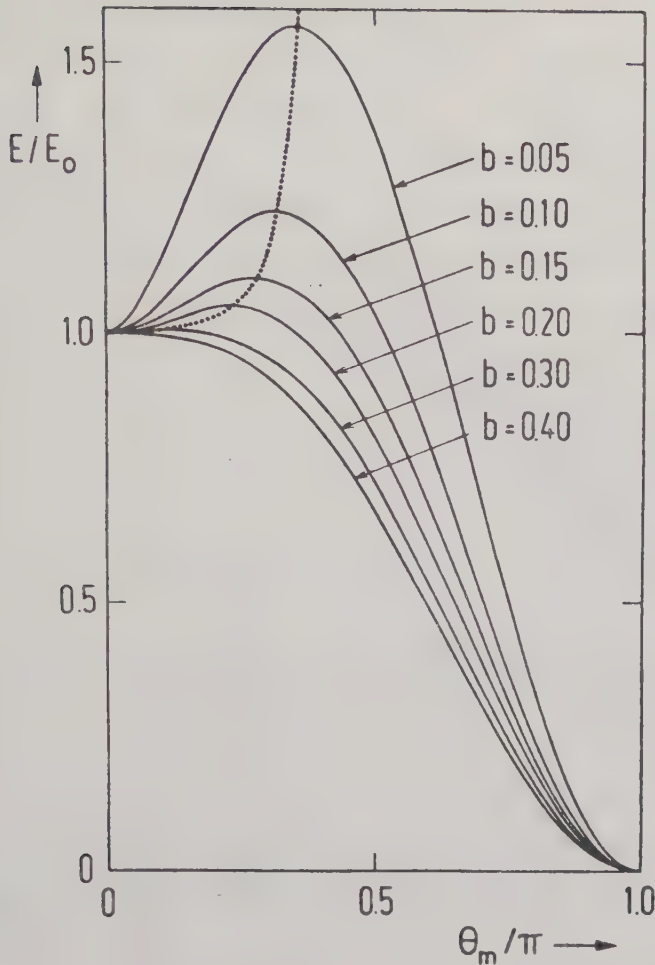


Fig. 2.3 Die variationsmäßig bestimmte Energie als Funktion von θ_m für verschiedene Magnetfelder b . Das Energiemaximum $E(\theta_m^*)$ bewegt sich für $b \rightarrow b_C = 1/3$ längs der gepunkteten Kurve.

2.3 Analytische und numerische Ergebnisse

Die Resultate der variationsmäßigen Bestimmung der nichtlinearen Anregungen im realen System können wie folgt zusammengefaßt werden:

1. Wir finden ein erweitertes Solitonenband mit einem kontinuierlichen Übergang von der planaren sine-Gordon Lösung ($E = E_0$, $\theta_m = 0$, $u = 0$) zu Anregungen mit niedriger Energie, aber endlicher Geschwindigkeit u_2 ($E \rightarrow 0$, $u \rightarrow u_2$, $\theta_m \rightarrow \pi$). Unterhalb der (sogenannten) kritischen Magnetfeldstärke $b_C = 1/3$ (18 KG in CsNiF_3) sind beide Grenzfälle durch eine Energiebarriere getrennt.

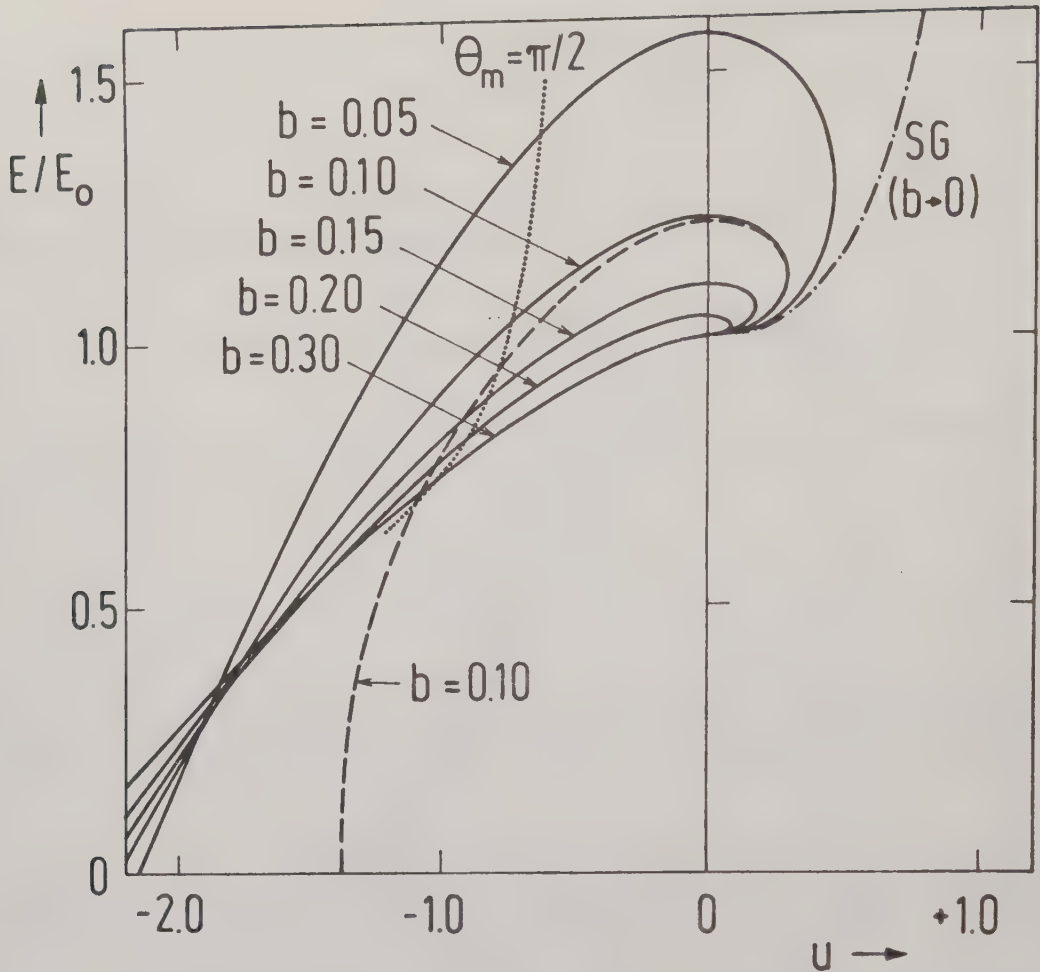


Fig. 2.4 Die Ergebnisse des Variationsansatzes für das von $E = E_0$, $u = 0$ bis zu $E = 0$ reichende kontinuierliche Solitonenband (die Energie als Funktion der Geschwindigkeit) für verschiedene Werte von b . $\theta_m = \pi/2$ wird da erreicht, wo die Kurven die gepunktete Linie schneiden. Ebenfalls dargestellt ist das planare sine-Gordon Band (SG). Die gebrochene Kurve enthält die Ergebnisse einer numerischen Simulation für $b = 0.1$.

2. Das kritische Feld b_C erhält man aus der Bedingung $(d^2E/d\theta_m^2)_{\theta_m=0} = 0$. Entwickelt man $E(\theta_m)$ für kleine θ_m in der Nähe von $b_C = 1/3$ (mit $1/3b \approx 1 + 3(b_C - b)$), ergibt sich die Ginzburg-Landau ähnliche Entwicklung

$$E/E_0 \approx 1 + \frac{3}{4} (b_C - b) \theta_m^2 - \frac{3}{32} \theta_m^4 \quad . \quad (2.19)$$

3. Für $b < b_C$ liefert der Variationsansatz zwei statische Lösungen ($u = 0$), die zu einem (lokalen) Energieminimum ($\theta_m = 0$, dies ist die planare sine-Gordon Konfiguration) bzw. einem Energiemaximum ($\theta_m^* \neq 0$) gehören. (Das Verschwinden von u bei einem Extremum von E folgt aus

Gl. (2.18)). Für $b = b_C$ verschmelzen Minimum und Maximum. Für $b > b_C$ stellt die sine-Gordon Lösung ein (globales) Energiemaximum dar. Es existiert kein lokales Minimum, das einer nichtplanaren Konfiguration zugeordnet werden könnte. Ein solches wurde von Kumar (1982) gefunden. Während die Energie in unserem Ansatz für $\theta_m > \theta_m^*$ stetig abnimmt, führt bei Kumar die Verwendung von Polarkoordinaten zu derart ungünstigen Konfigurationen (s. Fig. 2.2 für $\theta_m = \pi/2$), daß deren Energie schließlich wieder ansteigt und das künstliche Minimum entstehen läßt.

4. Der kritische Wert $b_C = 1/3$ wurde bereits von Magyari und Thomas (1982, 1983a) aus einer exakten, von ihnen mittlerweile als energetische Stabilitätsanalyse bezeichneten Untersuchung des Energiefunktional (2.6) gewonnen (für $u = 0$ sind K und E identisch): E wird bis zur zweiten Ordnung in den Abweichungen $\phi(z)$, $\theta(z)$ von der exakten statischen planaren Lösung entwickelt und als quadratische Form geschrieben (s. auch Kap. 3):

$$E = \int dz \left\{ \phi(z) M_1 \phi(z) + \theta(z) M_2 \theta(z) \right\} . \quad (2.20)$$

Die entsprechenden Eigenwertprobleme (die M_i sind Operatoren) können gelöst werden. Für $b = b_C = 1/3$ schien der Nulldurchgang eines Eigenwertes λ eine Instabilität gegenüber einer θ -Fluktuation anzudeuten ($\lambda < 0$ für $b > 1/3$). Diese Interpretation wird auch von diesen Autoren nicht mehr aufrechterhalten (Magyari und Thomas 1983a) und muß aufgrund unserer Ergebnisse ebenfalls zurückgewiesen werden. Zwar suggeriert die Energiekurve für $b > b_C$, daß das statische Soliton instabil ist (es gehört zu einem Energiemaximum), aber es handelt sich dabei nicht um ein Teilchen auf einem Potentialberg! Wenn im System eine θ -Fluktuation auftritt, so kann sich die Konfiguration bei einer endlichen Geschwindigkeit stabilisieren: die Energie wird dadurch tatsächlich abgesenkt (dies mag den Begriff 'energetische Instabilität' rechtfertigen), aber die Lösung ist ('dynamisch') stabil: Eine kleine Änderung in θ führt lediglich zu einer kleinen Änderung der Geschwindigkeit. Diese Aussage kann man

allerdings nicht dem Variationsansatz entnehmen, wohl aber der numerischen Simulation (s. unten). Theoretisch muß sie sich auch aus der Untersuchung der Wirkungsfunktion ergeben: Diese müßte um die interessierende Lösung herum entwickelt werden, wobei die Abweichungen nicht auf die Form $\vec{s}(z-ut)$ eingeschränkt werden dürften. Die Zeit muß wieder eine selbständige Rolle einnehmen. Das Funktional K dagegen ist eben wegen dieser Beschränkungen nicht geeignet, Aussagen über die Stabilität der Lösungen zu treffen.

5. Für festes $b < b_c$ weist die Energie als Funktion der Geschwindigkeit an einer Stelle eine vertikale Tangente auf (Fig. 2.4). Die betreffende Geschwindigkeit wird als kritische Geschwindigkeit u_c bezeichnet:
 $dE/du \propto (u_c - u)^{-1/2}$ für $u \rightarrow u_c(b)$. Der zugehörige Winkel θ_m^c zeichnet auf der Energiekurve $E = E(\theta_m)$ allerdings keinen besonderen Punkt aus. Zwar ist (analog zur Bestimmung von b_c) auch u_c dadurch gegeben, daß ein Minimum und ein Maximum von K (als Funktion von θ_m) verschmelzen (Magyari und Thomas 1982). Für $b = b_c$ haben wir ja gesehen, daß die beiden statischen Lösungen zusammenfallen: das Minimum von K verschwindet auch hier (für $u = 0$ sind K und E identisch). Es folgt damit $u_c(b_c) = 0$. Dabei ist das Minimum von K (zu gegebenem u) den Lösungen mit $0 < \theta_m < \theta_m^c$ (also dem unteren Zweig der Dispersion $E = E(u)$) zuzuordnen, das Maximum denen mit $\theta_m^c < \theta_m < \theta_m^*$. (In Fig. 2.4 sind die Kurven mit $\theta_m^* < \theta_m < \pi$ negativen Geschwindigkeiten zugeordnet. Die entsprechenden Kurven für positive Geschwindigkeiten erhält man durch Spiegelung an der Energieachse bei gleichzeitigem Vorzeichenwechsel von θ_m , also $-\pi < \theta_m < -\theta_m^*$. Zu gegebenem positivem u stellen sie ebenfalls ein Maximum von K dar.) Man kann aber nicht sagen, daß die Konfigurationen mit $\theta_m > \theta_m^c$ instabil sind. Darauf haben bereits Wysin et al. (1982) als ein Ergebnis ihrer Computersimulation hingewiesen. Auf die Bedeutung der Wurzelsingularität in der Energieableitung dE/du wird noch im nächsten Kapitel eingegangen. Es sei bemerkt, daß die exakten Resultate zur Abhängigkeit der kritischen Geschwindigkeit vom

Magnetfeld (Magyari und Thomas 1982) von unserem Ansatz praktisch reproduziert werden, einschließlich des Potenzgesetzes $u_C(b) \propto (b_C - b)^{3/2}$ für $b \rightarrow b_C = 1/3$.

Zur Bestätigung des Variationsansatzes und zur Untersuchung der Stabilität der Lösungen wurde eine numerische Simulation der Spindynamik (2.2) für eine Kette von 200 Spins bei periodischen Randbedingungen durchgeführt. Als Startkonfiguration diente in den meisten Fällen die Variationslösung (ausgenommen sind nur Werte von θ_m sehr nahe bei π). Die numerisch ermittelte Dispersionskurve $E = E(u)$ ist für $b = 0.1$ in Fig. 2.4 gestrichelt eingetragen. Es bleibt hinzuzufügen:

6. Die Startkonfiguration relaxiert zu einer numerisch stabilen, propagierenden Solitonlösung. Diese Tatsache erscheint uns als starkes Indiz für die Stabilität der Lösungen im gesamten Bereich der Dispersionskurve. Diese Relaxation tritt aber nur dann auf, wenn der Variationsansatz alle wesentlichen Eigenschaften der endgültigen Lösung bereits enthält. Dies ist sicher nicht mehr der Fall in der Simulation von Wysin et al. (1982) für $\theta_m \rightarrow \pi/2$, die als Startkonfiguration das sine-Gordon Soliton wählen und sphärische Polarkoordinaten verwenden: die Dispersion endet mit einer Schockwelle.
7. Praktisch bis zur zweiten statischen Lösung (mit $\theta_m^* = 0.34 \pi$) ist die Übereinstimmung zwischen der numerischen Dispersion und der variationsmäßig bestimmten sehr gut. Die Projektion der (numerischen) Solitontrajektorien in die x, z -Ebene (Fig. 2.5) stellen praktisch die vom Variationsansatz geforderten Kreisprojektionen, also Geraden, dar. Für $\theta_m > \theta_m^*$ werden die Abweichungen gravierend: für θ_m sehr nahe bei π treten räumliche Oszillationen auf, die im Variationsansatz nicht mehr enthalten sind. In diesem Bereich stellt die Variationslösung keine geeignete Startkonfiguration mehr dar (keine Relaxation!). Eine numerisch stabile Lösung konnte nur durch eine Berücksichtigung der Oszillationen schon in der Startkonfiguration erreicht werden.

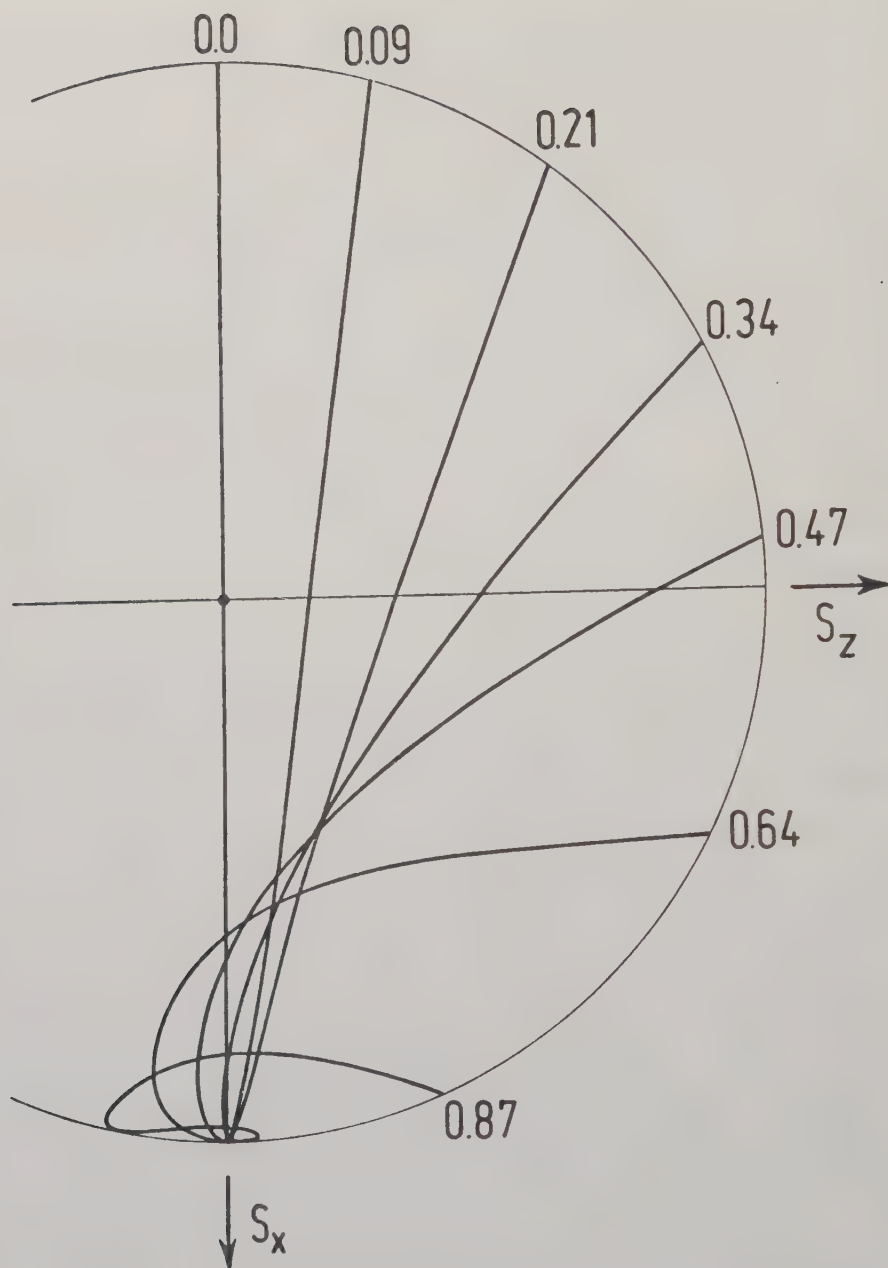


Fig. 2.5 Projektion der numerisch ermittelten stabilen Trajektorien (nach der Relaxation aus der Startkonfiguration) für $b = 0.1$. Die Werte von Θ_m/π sind angezeigt. Die Abweichungen von den vom Variationsansatz geforderten Geraden werden für wachsendes Θ_m sichtbar. Bei $\Theta_m = 0.87 \pi$ treten sogar räumliche Oszillationen auf.

8. Daß solche Oszillationen auftreten müssen, kann man einer asymptotischen Analyse der Bewegungsgleichungen (2.4) entnehmen (Magyari und Thomas 1983b, Schöbinger 1983b). Bis zu einer Geschwindigkeit u_1 sind die Lösungen rein exponentiell abfallend, für $u_1 < u < u_2$ gilt dies nur noch

für die Einhüllende der jetzt einsetzenden Oszillationen wohl definierter Wellenlänge. Für $u \rightarrow u_2$ (entspricht $\theta_m \rightarrow \pi$) wird der Abfall der Einhüllenden immer langsamer, dafür nimmt aber auch die Amplitude der Lösungen (Abweichung vom Grundzustand) ab: die Lösung wird immer ähnlicher einem Magnon, bis schließlich die Dispersionskurve der nichtlinearen Anregungen an die der Magnonen anschließt: u_2 stellt die minimale Phasengeschwindigkeit des Magnonensystems dar. Es sei bemerkt, daß aus der asymptotischen (linearisierten) Form der Bewegungsgleichungen zwar auf den Charakter der exakten Lösung geschlossen werden kann, aber zur Integration ist natürlich die volle Bewegungsgleichung nötig, auch bei den eben beschriebenen Lösungen kleiner Amplitude. (Ohne die Nichtlinearität könnten die asymptotisch ermittelten Ausläufer der Konfiguration nicht zusammengefügt werden.)

Zusammenfassend ist festzustellen, daß es im gesamten Bereich der Dispersionskurve stabile, nichtlineare Anregungen gibt. Die Lösungen im Bereich $0 < u < u_c$ zeigen zwar deutliche Abweichungen vom sine-Gordon Bild (s. Fig. 2.4), aber das Auftreten lokalisierter Anregungen endlicher Ruheenergie, auch im realen System, darf als gesichert gelten, jedenfalls solange eine hinreichende Energiebarriere diesen Zweig der Dispersionskurve von den Anregungen kleiner Energie (mit $E \rightarrow 0$ für $\theta_m \rightarrow \pi$) und damit vom Grundzustand trennt: bei einer Berücksichtigung der Dämpfung relaxieren alle Anregungen mit $\theta_m < \theta_m^*$ in Richtung auf das statische sine-Gordon Soliton hin. Bei $b = 0.1$ hat die Barriere eine Höhe von $10 K$, ist also doppelt so groß wie die Anisotropieenergie. Für die bisher im Experiment benutzten Magnetfelder $b < 0.2$ (10 KG für CsNiF_3) erscheint daher eine Deutung der Ergebnisse durch die sine-Gordon Theorie sehr sinnvoll.

3. DER PLANARE FERROMAGNET IM GEKIPPTEN MAGNETFELD

3.1 Zusammenfassung der Ergebnisse

Im vorangegangenen Kapitel wurde gezeigt, daß eine Analyse des (negativen) Lagrangian des Systems, K , zwar keine Aussage über die Stabilität der Lösungen zuläßt, aber sie liefert die richtigen (sogenannten) kritischen Werte für das Magnetfeld ($b_C = 1/3$) und die Geschwindigkeit ($u_C(b)$). Diese setzen Grenzen für die Verwendbarkeit bestimmter Modelle: Für $b = b_C$ entfällt die Energiebarriere zwischen dem statischen sine-Gordon Soliton und dem Grundzustand. Das phänomenologische Bild von einem Gas freier (Quasi-) Teilchen, das zur Berechnung thermodynamischer Eigenschaften herangezogen wird (s. Kap. 3.4), ist aber auf die Existenz einer Lücke im Spektrum (die dann als Ruheenergie der Teilchen interpretiert wird) angewiesen. Die kritische Geschwindigkeit wiederum begrenzt (für $b < b_C$) den Zweig der Dispersionsrelation, der diejenigen Anregungen enthält, die den Lösungen der approximierten Bewegungsgleichungen (2.7) - also sine-Gordon Soliton für den Winkel φ und kleine θ -Komponente - deutlich ähneln. Magyari und Thomas (1982) haben gezeigt, daß sich die vertikale Tangente in der Energiedispersion $E(u)$ bei $u = u_C(b)$ als (Wurzel-) Singularität im dynamischen Strukturfaktor $S(q, \omega)$ bei $\omega_C = u_C(b) \cdot q$ bemerkbar machen sollte (ω und q in Einheiten von $1/\tau_0$ bzw. $1/\delta_0$). Obwohl diese Frequenz deutlich kleiner ist als die Abschneidefrequenz $\omega_{SG} = c_0 \cdot q$ des planaren sine-Gordon Modells, liegt sie (für die experimentell relevanten Magnetfelder) immer noch in den Flanken von $S(q, \omega)$. Die Singularität bei ω_C wird daher leicht durch die breiten Magnonresonanzen unterdrückt und ist bisher noch nicht beobachtet worden.

Ähnlich wie bei unserer Untersuchung zur Erzeugung nichtthermischer Solitonen haben wir deshalb den planaren Ferromagneten in Anwesenheit eines zweiten Magnetfeldes $\vec{B}$ parallel zur harten Achse (der Anisotropierichtung) untersucht, um durch Variation dieses zusätzlichen Parameters (möglichst experi-

mentell überprüfbar) Aufschluß über den Charakter der Solitonendispersion (also z.B. das Auftreten von Singularitäten) zu gewinnen. Die technische Realisierung sollte hier einfacher sein, da das zusätzliche Feld zeitunabhängig und räumlich homogen sein kann. Seine Auswirkungen können wie folgt beschrieben werden (Hackenbracht und Schuster 1983a,b):

- 1) Die Abschneidefrequenzen ω_c , bei denen die Singularitäten auftreten, werden geändert und differieren jetzt für Solitonen und Antisolitonen (mit gleicher Bewegungsrichtung).
- 2) Der Beitrag der Kinks (Solitonen und Antisolitonen) zu $S(q, \omega)$ verschwindet bei niedrigen Frequenzen $|\omega| < \omega_{\min}(\tilde{B})$, falls das Magnetfeld in Kettenrichtung eine bestimmte Stärke, $\tilde{B}_c$, überschreitet. Für einen typischen Wert des symmetriebrechenden Feldes in der Ebene ($B = 10 \text{ KG}$) liegt dieser Wert bei $\tilde{B}_c = 3.6 \text{ KG}$ (für CsNiF_3).
- 3) Die Ruheenergie der Kinks wird in Anwesenheit des zweiten Magnetfeldes kleiner.

Aus den genannten Punkten sollten sich folgende experimentell beobachtbare Konsequenzen ergeben (die Zahlenwerte gelten alle für CsNiF_3):

- 4) In einem Neutronenstreuexperiment mit festem Wellenvektor q weist der Kink-induzierte Anteil zum dynamischen Strukturfaktor eine Lücke um $\omega = 0$ mit der Breite $2 \omega_{\min}$ auf (ca $50 \text{ } \mu\text{eV}$ bei $B = 10 \text{ KG}$, $\tilde{B} = 5.4 \text{ KG}$, $q = 0.1 \pi/a$, wobei a wieder der Abstand zweier Ni-Ionen in der Kette ist). Die integrierte Intensität $I = \int d\omega S(q, \omega)$ wird bis zu 40% verstärkt: $I(\tilde{B} = 5.4 \text{ KG})/I(\tilde{B} = 0) \approx 1.38$ ($T = 12 \text{ K}$, B und q wie oben). Diese Veränderungen liegen innerhalb des Auflösungsvermögens dieser Experimente (Steiner, private Mitteilung).

- 5) In einem NMR-Experiment tritt in der Nähe von $\tilde{B}_c$ eine deutliche Variation der Kink-induzierten Relaxationszeit T_1 eines mit dem elektronischen (Ni-) Spinsystem wechselwirkenden (Cs-) Kernspins auf. Der Zusammenhang mit dem Strukturfaktor ist über $1/T_1 \propto \int dq S(q, \omega)$ etabliert (s. Kap. 3.4).

Im folgenden werden diese Ergebnisse sowohl durch eine Ginzburg-Landau Entwicklung als auch durch eine variationsmäßige Analyse des Funktional K hergeleitet und die experimentellen Konsequenzen in Kap. 3.4 detailliert dargestellt.

3.2 Die Ginzburg-Landau Entwicklung

In Anwesenheit des Feldes parallel zur z-Richtung muß der Hamiltonian H aus Gl. (2.1) ergänzt werden (vgl. Gl. (1.8)) zu

$$\tilde{H} = H - \sum_i g \mu_B \tilde{B} S_{i,z} \quad . \quad (3.1)$$

Wie eingangs erwähnt, interessieren wir uns nur für den Zweig der Dispersionsrelation, der mit dem statischen sine-Gordon Soliton verbunden ist, also für den unteren Zweig im Bereich $0 < u < u_c(b)$. Hier ist die Verwendung von Polarkoordinaten zur Darstellung des Spinvektors zulässig (θ ist deutlich kleiner als $\pi/2$). Insbesondere die kritischen Geschwindigkeiten $u_c(b)$ (für $\tilde{B} = 0$) ergeben sich fast identisch sowohl aus der approximierten Extremalisierung des Funktional K mit Hilfe unseres kartesischen Variationsansatzes (2.14) als auch bei Verwendung eines Ansatzes in Polarkoordinaten (Magyari und Thomas 1982) und stimmen gut überein mit den (numerisch ermittelten) exakten Werten (Magyari und Thomas 1982). Daher wird ausschließlich diese Parametrisierung im vorliegenden Kapitel benutzt. Die Kontinuumsversion von $\tilde{H}$ lautet dann

$$\tilde{E} [\theta, \varphi] = E [\theta, \varphi] - \tilde{b} \int dz \sin \theta \quad , \quad (3.2)$$

wobei $E [\theta, \varphi]$ der Gl. (2.6) zu entnehmen ist und $\tilde{b} = \tilde{B}/B_A$ (alle Einheiten wie in Kap. 2). Die Bewegungsgleichungen ergeben sich als Euler-Lagrange Gleichungen des entsprechenden Funktionals $\tilde{K}$, solange man sich auf den Lösungstyp $\vec{s} = \vec{s}(z-ut)$ einschränkt:

$$\tilde{K} [\theta, \varphi] = \tilde{E} [\theta, \varphi] + u F [\theta, \varphi] \quad . \quad (3.3)$$

Lediglich die Gl. (2.4b) für $\dot{\varphi}$ muß auf der rechten Seite durch den Term $\tilde{b} \cos \theta$ erweitert werden. Das Funktional F bleibt unverändert (Gl. (2.12)).

Wie schon im Kap. 2.3 erwähnt (Gl. 2.20)), haben Magyari und Thomas (1982) das kritische Magnetfeld $b_C = 1/3$ aus einer 'energetischen Stabilitätsanalyse' des Energiefunktional E ($= K$ für $u = 0$) gewonnen. Die zum relevanten Eigenwert λ (der bei b_C den Nulldurchgang aufweist) gehörige θ -Mode hat die Form

$$\theta(z) = \theta_m / \cosh^2 (z b^{1/2}) \quad (3.4)$$

und entspricht damit genau der funktionalen Abhängigkeit von $s_z(z)$ ($\approx \theta(z)$ für kleine θ) unseres Variationsansatzes (2.14) (da $1 - \cos \psi(z) = 2/\cosh^2 (z b^{1/2})$). Die Entwicklung des Energiefunktional E um die (für $u = 0$ und $\tilde{b} = 0$ exakte) statische sine-Gordon Lösung φ_k , $\theta_k = 0$ (also $\varphi(z) = \varphi_k(z) + \phi(z)$, $\theta(z) = \theta_k(z) + \theta(z)$; entwickelt wird bis zur zweiten Ordnung in diesen Abweichungen) reproduziert daher den Ausdruck (2.19) in führender Ordnung von θ_m (in der Nähe von $b = b_C = 1/3$!):

$$E/E_0 = 1 + \frac{3}{4} (b_C - b) \theta_m^2 - \frac{1}{10} \theta_m^4 \quad . \quad (3.5)$$

Die (unwesentliche) Abweichung im letzten Term rührt daher, daß Magyari und Thomas (1982) $\phi(z)$ aus dem Eigenwertproblem (2.20) bestimmten ($\xi = z b^{1/2}$):

$$\phi(z) = \theta_m^2 \left(\sinh \xi / \cosh^2 \xi + \frac{1}{2} \sinh \xi / \cosh^4 \xi \right) \quad ,$$

wohingegen der kartesische Variationsansatz (2.14) die Form

$$\phi(z) = \theta_m^2 \left(\frac{1}{4} \sinh \xi / \cosh^2 \xi + \frac{1}{2} \sinh \xi / \cosh^4 \xi \right)$$

vorschreibt.

Für $u \neq 0$ und $\tilde{b} \neq 0$ treten in $\tilde{K}$ Terme auf, die (für $|u| \ll 1$ und $|\tilde{b}| \ll 1$) als kleine Störungen zu E aufgefaßt werden. Benutzt man wiederum die obige Entwicklung, erhält man die Ginzburg-Landau ähnliche Form

$$\tilde{K} = E_0 + (c_1 u - \tilde{c}_1 \tilde{b}) \theta_m + c_2 (b_C - b) \theta_m^2 - c_4 \theta_m^4 \quad (3.6)$$

mit $c_1 = \pm \pi$ (das obere Vorzeichen für Solitonen), $\tilde{c}_1 = 2 b_C^{-1/2}$, und (aus Gl. (3.5) mit $E_0 = 8 b_C^{1/2}$) $c_2 = 6 b_C^{1/2}$, $c_4 = 4/5 b_C^{1/2}$.

Die kritische Geschwindigkeit ist wiederum dadurch gegeben, daß ein Minimum und ein Maximum von $\tilde{K}$ verschmelzen (Magyari und Thomas 1982, vgl. auch Kap. 2.3). Die Bedingung dafür lautet

$$\left[\frac{c_1 u - \tilde{c}_1 \tilde{b}}{8 c_4} \right]^2 - \left[\frac{c_2}{6 c_4} (b_C - b) \right]^3 = 0 \quad (3.7)$$

Für festes b ergibt sich daraus die Grenzgeschwindigkeit $u_C(\tilde{b})$.

Für $\tilde{b} \neq 0$ wirkt sich das für Solitonen und Antisolitonen unterschiedliche Vorzeichen von c_1 dahingehend aus, daß sich die Grenzgeschwindigkeit jetzt für (Quasi-) Teilchen mit verschiedenem Drehsinn (also Solitonen und Antisolitonen mit gleicher Bewegungsrichtung; vgl. Kap. 1, Gl. (1.7)) unterscheidet. Für $u > 0$ sind die Werte in Tab. 3.1 aufgeführt (für $u < 0$ tauschen Solitonen und Antisolitonen die Rolle).

Dabei bedeutet in Tab. 3.1 $u_C(0)$ die kritische Geschwindigkeit für $\tilde{b} = 0$:

Tabelle 3.1 Kritische Geschwindigkeiten (für $u > 0$)

	Solitonen	Antisolitonen
$\Delta < u_C(0)$	$0 < u < u_C(0) + \Delta$	$0 < u < u_C(0) - \Delta$
$\Delta > u_C(0)$	$\Delta - u_C(0) < u < \Delta + u_C(0)$	nicht vorhanden

$$u_C(0) = \frac{8 c_4}{c_1} \left[\frac{c_2}{6 c_4} (b_C - b) \right]^{3/2} = 1.64 \left(\frac{1}{3} - b \right)^{3/2}$$

und

$$\Delta = \frac{|c_1|}{\tilde{c}_1} \tilde{b} = 0.91 \tilde{b} .$$

Für $\Delta > u_C(0)$, d.h. für $\tilde{b} > \tilde{b}_C = 1.1 u_C(0)$, sind Antisolitonen (mit $u > 0$; allgemeiner also Teilchen mit negativem Drehsinn) nicht mehr vorhanden, und Solitonen treten erst ab einer bestimmten Mindestgeschwindigkeit $u_{\min}^S = \Delta - u_C(0)$ auf. Den Grund für die Diskriminierung der Teilchen entgegengesetzten Drehsinns kann man bereits den genäherten Gleichungen (für $|\theta| \ll 1$, $b \ll 1$, $|\tilde{b}| \ll 1$; vgl. Gl. (2.7))

$$\dot{\theta} = \varphi'' - b \sin \varphi \quad (3.8a)$$

$$\dot{\varphi} = \theta - \tilde{b} \quad (3.8b)$$

entnehmen, die zur bekannten sine-Gordon Kinklösung $\varphi = \varphi_k$ (s. Gl. (2.8a)), aber zu einer modifizierten θ -Komponente führen ($Z = z - ut$):

$$\theta = \mp u \gamma b^{1/2} \frac{2}{\cosh(\gamma Z b^{1/2})} + \tilde{b} . \quad (3.9)$$

Die kritische Geschwindigkeit $u_C(\tilde{b})$ ist dann größer als $u_C(0)$, wenn die beiden Summanden in θ entgegengesetztes Vorzeichen haben. Anschaulich ist dies in Fig. 3.1 dargestellt.

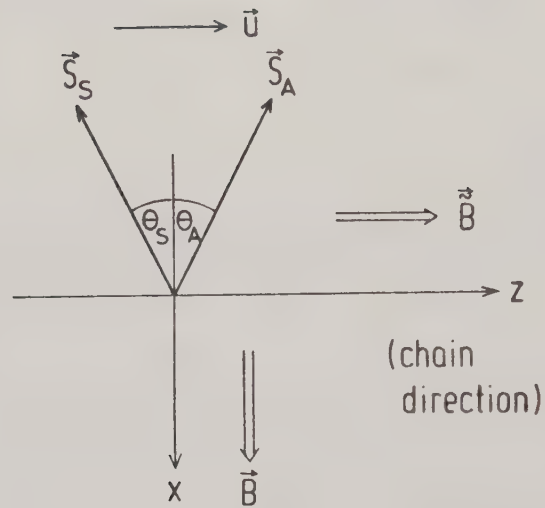


Fig. 3.1 Geometrie der Felder und die Amplitude θ der s_z -Komponente (aus der Ebene leichter Magnetisierung heraus) für Solitonen (S) und Antisolitonen (A) mit der Geschwindigkeit $\vec{u}$ (noch ohne das zusätzliche Feld).

Die Ginzburg-Landau Entwicklung zeigt somit alle erwarteten Resultate, aber wegen des stark limitierten Gültigkeitsbereichs ($|\vec{u}| \ll 1$, $|\vec{b}| \ll 1$, $b \approx b_C$) haben wir auch noch eine variationsmäßige Analyse des Funktionals $\tilde{K}$ durchgeführt.

3.3 Ergebnisse der Variationsrechnung

Ein laufender Kink wird durch einen Ansatz beschrieben, der von der Form her so aussieht wie die Lösung der approximativen Bewegungsgleichungen (3.8), wobei hier explizit zwischen Solitonen (S) und Anitsolitonen (A) unterschieden werden muß:

$$\varphi_{S/A}(Z) = 4 \arctan \exp (\pm Z/\delta) \quad (3.10a)$$

$$\theta_{S/A}(Z) = D/\cosh (Z/\delta) + \tilde{b} \quad (3.10b)$$

Vergleichbar zum Ansatz (2.14) stellen δ und D wiederum die Breite des Kinks und die maximale (dynamisch bedingte) Abweichung der Spins vom Gleichgewichtszustand (hier $\bar{\theta} = \tilde{b}$) dar. Da sich aus den Extremalbedingungen (3.13) unterschiedliche Werte für D und δ (zu festem u) für Solitonen bzw. Antisolitonen ergeben, trägt auch θ die entsprechende Indizierung (ebenso wie die Energie in (3.12b)).

Die Verwendung von (3.10b) anstelle der von Magyari und Thomas (1982) gewählten Form $\tan \theta(Z) = D/\cosh (Z/\delta)$ erleichtert die Rechnungen ohne einen Verlust an Genauigkeit, wie ein Vergleich der kritischen Geschwindigkeiten (für $\tilde{b} = 0$) zeigt. Für $b \rightarrow 0$ tendieren die Ergebnisse ebenfalls zum sine-Gordon Limes, wie schon aus den Rechnungen von Magyari und Thomas (1982) sowie unserer Analyse (s. Fig. 2.4) bekannt. Da θ in Gl. (3.10b) von der exakten Eigenmode (3.4) abweicht, erhält man für $u \rightarrow 0$ allerdings $b_C = 3/8$ (die Ersetzung $\theta \rightarrow \tan \theta$ ändert daran auch nichts). Ein Variationsansatz mit einer Gl. (3.4) entsprechenden Form, also $\theta = D/\cosh^2 (Z/\delta) + \tilde{b}$, führt erwartungsgemäß zu ähnlichen Resultaten wie die Ginzburg-Landau Entwicklung (3.6) - auch dort wird die exakte Eigenmode benutzt - hat aber einen ebenso beschränkten Gültigkeitsbereich. Für experimentell verwendete Felder ($b < 0.2$) ist Ansatz (3.10) daher vorzuziehen.

Konsistent wird jetzt auch das Funktional $\tilde{K}$ bis zur quadratischen Ordnung in θ entwickelt (im Gegensatz zum sine-Gordon Hamiltonian, s. (1.3), werden allerdings Mischterme in θ und φ sowie θ' nicht vernachlässigt).

$$\tilde{K}[\theta, \varphi] = \int dz \left\{ \frac{1}{2} [(\theta')^2 + (\varphi')^2 (1 - \theta^2) + \theta^2] - b \cos \varphi \left(1 - \frac{\theta^2}{2}\right) - \tilde{b} \theta + u \varphi' \theta \right\} \quad (3.11)$$

und mit Hilfe von (3.10) in eine Funktion der Variationsparameter überführt

$$\tilde{K}_{S/A}(D, \delta) = \tilde{E}_{S/A}(D, \delta) + u \left\{ 4D + 2\pi \tilde{b} \right\} \quad (3.12a)$$

$$\begin{aligned} \tilde{E}_{S/A}(D, \delta) = D^2 \left\{ -\frac{7}{3} \frac{1}{\delta} + \delta \left(1 - \frac{b}{3} \right) \right\} - D 2\pi \tilde{b} \delta \\ + \left\{ 4 (1 - \tilde{b}^2) \frac{1}{\delta} + \delta (4b - 2b \tilde{b}^2) \right\}. \end{aligned} \quad (3.12b)$$

Konstante Terme in der Funktionaldichte (also die Grundzustandsenergie) wurden wieder subtrahiert. Solitonen (S) und Antisolitonen (A) mit entgegengesetzter Bewegungsrichtung verhalten sich gleich: $\tilde{K}_S(u) = \tilde{K}_A(-u)$. Die Analyse kann somit auf $u > 0$ beschränkt werden. Die extremalisierenden Parameter ergeben sich aus den Bedingungen

$$\frac{\partial \tilde{K}_{S/A}}{\partial D} = 0 \quad \text{und} \quad \frac{\partial \tilde{K}_{S/A}}{\partial \delta} = 0, \quad (3.13)$$

und sind zu gegebenem $b, \tilde{b}$ Funktionen von u : $\delta_{S/A}(u)$, $D_{S/A}(u)$. Die kritischen Geschwindigkeiten sind durch das Verschwinden des Minimums festgelegt.

Die Ergebnisse der Ginzburg-Landau Entwicklung werden bestätigt: Die kritische Geschwindigkeit für Solitonen steigt in Anwesenheit des Zusatzfeldes $\tilde{b}$, also $u_C^S(\tilde{b}) > u_C(0)$, wohingegen $u_C^A(\tilde{b}) < u_C(0)$. Dies ist in Fig. 3.2 dargestellt (für $b = 10/54$). Ebenso findet man ab einer Feldstärke $\tilde{b}_C$ eine Mindestgeschwindigkeit $u_{\min}^S$, die den Geschwindigkeitsbereich der Solitonen nach unten begrenzt. Antisolitonen sind

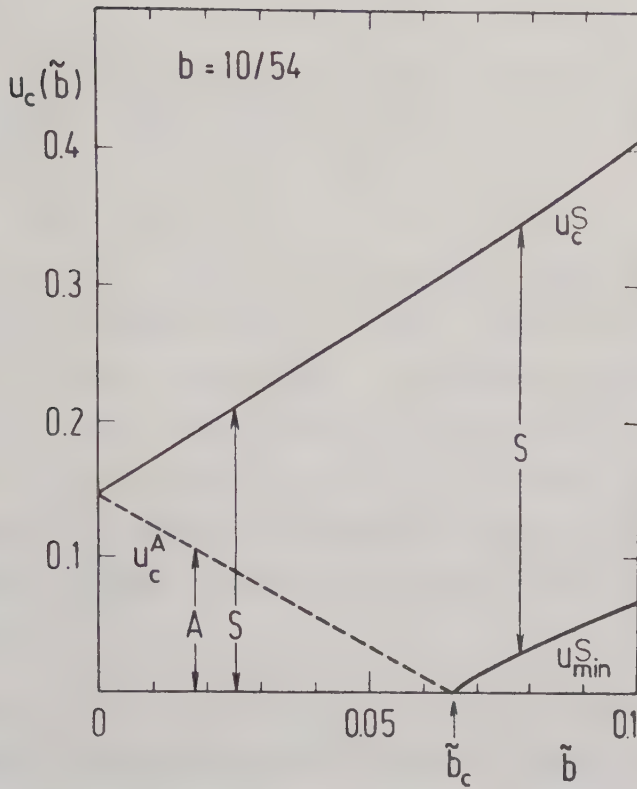


Fig. 3.2 Abhängigkeit der kritischen Geschwindigkeit vom Zusatzfeld für Solitonen (u_c^S und $u_{\min}^S$) und Antisolitonen (u_c^A). Die Pfeile skizzieren die Ausdehnung des zulässigen Geschwindigkeitsbereichs.

dann nicht mehr vorhanden. Dieser kritische Wert $\tilde{b}_C$ wächst an, wenn man das symmetriebrechende Feld b verkleinert ($\tilde{b}_C \approx 0.1$ für $b = 8.5/54$ z.B.). Im nächsten Abschnitt wird auf die experimentell überprüfbaren Konsequenzen eingegangen.

3.4 Die Auswirkungen auf den Strukturfaktor

Von besonderem Interesse ist der dynamische Strukturfaktor $S(q, \omega)$, also die Fouriertransformierte der Spinkorrelationsfunktion. Zur Auswertung solcher thermodynamisch zu mitteln- den Größen werden die möglichen Anregungen phänomenologisch als ein Gas freier, thermischer aktivierter (Quasi-) Teil- chen behandelt (Currie et al. 1980, Trullinger 1980). Dieses Bild ist beim sine-Gordon System durch einen Vergleich mit Resultaten anderer Methoden (Transfermatrixmethode zur Be- rechnung statischer Eigenschaften (Scalapino et al. 1972), Molekulardynamiksimulationen (Schneider und Stoll 1981)) abgesichert. Als (im Augenblick) einzig analytisch handhab- bares Modell werden wir es auch für das hier vorliegende Sy- stem des planaren Ferromagneten übernehmen. Dabei kommt der Tatsache, daß auch im realen System die uns interessierenden Anregungen durch eine Energiebarriere vom Grundzustand ge- trennt sind (jedenfalls für die experimentell verwendeten Magnetfelder) große Bedeutung zu. Nur die Lücke im Spektrum macht den oben erwähnten Vergleich mit Transfermatrixergeb- nissen erst möglich. Der Kink-induzierte Beitrag zum Struk- turfaktor läßt sich dann in der folgenden Form angeben

$$S(q, \omega) = n_S S_S^1 + n_A S_A^1 \quad . \quad (3.14)$$

Hierbei stellt S^1 den thermodynamisch gemittelten Beitrag eines Teilchens dar und n die jeweilige (thermische) Dich- te. Der Index S bezieht sich jetzt auf die Anregungen mit erweitertem Geschwindigkeitsregime (Solitonen mit $u > 0$ und Antisolitonen mit $-u$), der Index A entsprechend auf die anderen.

In einem idealen sine-Gordon System ist die Gesamtdichte aller Solitonen und Antisolitonen bestimmt durch (Trullin- ger 1980; der Faktor 2 ist in dieser Referenz allerdings in Z^* einbezogen)

$$n_{TOT} = 2 Z^*/L \quad , \quad (3.15)$$

wobei Z^* die renormierte Einteilchen-Zustandssumme darstellt und L die Länge des Systems (im Spinsystem also die Ausdehnung einer Kette). Die Renormierung ist erforderlich wegen des Austausches von Freiheitsgraden zwischen den Kinks und den Magnonen (den kleinen Oszillationen der sine-Gordon Gleichung). Für niedrige Temperaturen erhält man

$$Z^* = (L/\delta_0) b^{1/2} (\beta/\pi) Z \quad . \quad (3.16)$$

Hier ist Z die übliche Zustandssumme, also

$$Z = \int_{-\infty}^{\infty} du \frac{1}{u} \frac{dE_k(u)}{du} \exp \left\{ -\beta E_k(u) \right\} \quad . \quad (3.17)$$

Die Mittelung über die Impulse wurde durch eine solche über Geschwindigkeiten ersetzt. $E_k(u)$ ist die Energie der Kinks, $\beta = \epsilon_0/k_B T$.

Die Verhältnisse im realen System werden durch eine Restriktion des Integrationsbereichs in (3.17) auf die zulässigen Geschwindigkeiten berücksichtigt. Für die Dichten $n_{S/A}$ erhält man dann ($\lambda = \beta b^{1/2}/(\pi \delta_0)$)

$$n_S = \lambda \int_{u_{\min} < |u| < u_C^S} du \left\{ \frac{1}{u} \frac{dE_S}{du} \exp \left(-\beta E_S \right) \right\} \quad (3.18a)$$

$$n_A = \lambda \int_{0 < |u| < u_C^A} du \left\{ \frac{1}{u} \frac{dE_A}{du} \exp \left(-\beta E_A \right) \right\} \quad . \quad (3.18b)$$

Die Energien $E_{S/A}$ ergeben sich aus Gl. (3.12b) durch Einsetzen der jeweiligen extremalisierenden Parameter $D_{S/A}$ und $\delta_{S/A}$ aus (3.13). Für $\tilde{b} < \tilde{b}_C$ gilt $u_{\min} = 0$, für $\tilde{b} > \tilde{b}_C$ $u_{\min} = u_{\min}^S$. Der Faktor 2 aus Gl. (3.15) entfällt jetzt wegen der Aufteilung der Dichte in n_S und n_A . Die Integranden in (3.18) schließlich definieren eine geschwindigkeitsabhängige Dichte $n(u)$. Die Einteilchen-Beiträge S^1 sind bei Steiner (1979) angegeben und man erhält für den Strukturfaktor

$$S_{\alpha\alpha}(q, \omega) = 2\pi \tau_0 \left\{ \sum_{k=S,A} n_k(u) |q|^{-1} |M_{\alpha\alpha}^k(q, u)|^2 \right\}_{u=\omega/q} \quad (3.19)$$

Die Klammer muß an der Stelle $u = \omega/q$ ausgewertet werden. $M_{\alpha\alpha}^k$ stellen Formfaktoren dar, die die endliche Ausdehnung der Kinks berücksichtigen. Der Index α bezieht sich auf die Spinkomponente ($\alpha = x, y, z$). Mit der Approximation $S_x \sim (1-\theta^2) \cos \varphi$, $S_y \sim (1-\theta^2) \sin \varphi$, $s_z \sim \theta$ und φ, θ aus dem Variationsansatz (3.10) ergibt sich ($\eta = \pi q \delta(u)/2$)

$$M_{xx}^k = 2 \delta_0 \delta_k(u) \pi^{-1} (\eta / \sinh \eta) (1 - \delta M_{xx}) \quad (3.20a)$$

$$\delta M_{xx}^k = \frac{\tilde{b}^2}{2} + \tilde{b} D_k(u) \pi^{-1} \eta \tanh \eta + \frac{D_k^2(u)}{12} + \frac{1}{3} \left[\frac{D_k(u) \eta}{\pi} \right]^2 \quad (3.20b)$$

$$M_{zz}^k = \frac{1}{2} \delta_0 \delta_k(u) D_k(u) / \cosh \eta \quad (3.20c)$$

Die Funktion M_{yy}^k entsteht aus M_{xx}^k durch das Ersetzen von $\sinh \eta$ durch $\cosh \eta$.

Im endlichen Zusatzfeld $\tilde{b}$ finden wir die folgenden Ergebnisse:

- 1) Die Aufspaltung der kritischen Geschwindigkeiten nach Solitonen und Antisolitonen verdoppelt die Zahl der von Magyari und Thomas (1982) vorhergesagten Singularitäten im $S(q, \omega)$ und verschiebt sie auf die neuen Positionen $\omega = \pm q u_C^{S/A}$ (für $\tilde{b} > \tilde{b}_C$ muß u_C^A durch $u_{\min}^S$ ersetzt werden).
- 2) Für $|\omega| > q u_C^A$ tragen nur die Anregungen mit dem erweiterten Geschwindigkeitsbereich zu $S(q, \omega)$ bei. Die für $\tilde{b} > \tilde{b}_C$ erforderliche Mindestgeschwindigkeit dieser Anregungen führt zu der eingangs erwähnten Lücke im Strukturfaktor: $S(q, \omega) = 0$ für $|\omega| < q u_{\min}^S$. Diese Lücke sollte in einem Neutronenstreuexperiment direkt zugänglich sein.

- 3) Die Ruheenergie der Quasiteilchen nimmt mit wachsendem $\tilde{b}$ ab (Fig. 3.3). Dies ist darauf zurückzuführen, daß das Zusatzfeld auch bei einem statischen Kink eine inhomogene S_z -Komponente hervorruft, was zu einer günstigeren Zeeman-Energie führt. Der Boltzmannfaktor in (3.18) nimmt also für alle Anregungen zu. Damit konkurriert jetzt die Veränderung der Geschwindigkeitsbereiche. Während die Dichte

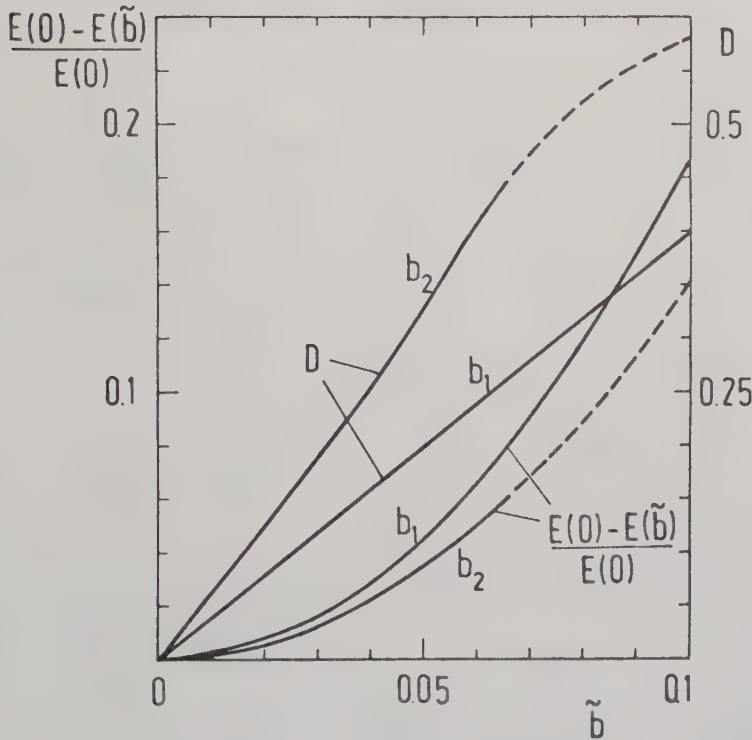


Fig. 3.3 Durchgezogene Kurve: relative Energiedifferenz $(E(0) - E(b))/E(0)$ und die Amplitude D des inhomogenen Anteils von θ für einen statischen Kink (Soliton und Antisoliton). Gestrichelte Kurve: dieselben Daten für einen Kink mit $|u| = u_{\min}^S$. Es ist $b_1 = 5/54$ und $b_2 = 10/54$.

der einen, n_A , somit für $\tilde{b} \rightarrow \tilde{b}_C$ schließlich abnimmt und verschwindet (da $u_C^A \rightarrow 0$), kann der Zuwachs in n_S diesen Verlust sogar überkompensieren. Insgesamt sind - bei gegebener Temperatur T - mehr Quasiteilchen angeregt, so daß die integrierte Intensität

$$I(\tilde{b}) = \int d\omega S(q, \omega) = 2\pi \tau_0 \left\{ \int_{u_{\min} < |u| < u_C^S} du n_S(u) |M^S(q, u)|^2 + \int_{0 < |u| < u_C^A} du n_A(u) |M^A(q, u)|^2 \right\} . \quad (3.21)$$

anwächst, verglichen mit $I(\tilde{b}=0)$. Dies ist in Fig. 3.4 dargestellt, und zwar für die longitudinale Komponente S_{xx} . Für S_{yy} ist der Zuwachs noch stärker. Der Beitrag von S_{zz} zeigt dasselbe Verhalten, ist aber merklich kleiner (10%). Für kleinere b und T ($8 b^{1/2} T^{-1}$ wird konstant gehalten) sind die Effekte deutlich ausgeprägter.

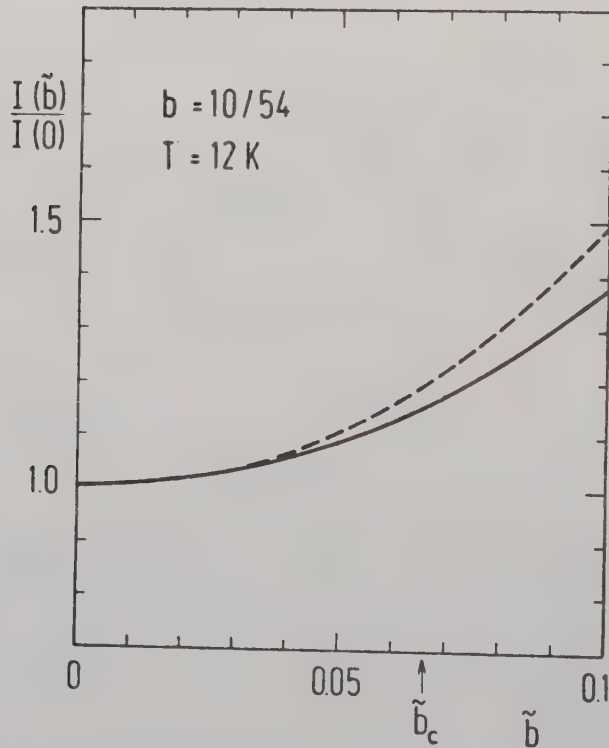


Fig. 3.4 Integrierte Intensität des Kink-induzierten Anteils zum Strukturfaktor $S_{xx}(q, \omega)$ für $q = 0.1 \pi/a$ (durchgezogene Linie) und $q = 0.05 \pi/a$ (gestrichelte Linie) als Funktion des Zusatzfeldes.

- 4) Die Modifikation der Geschwindigkeitsbereiche hat auch Auswirkungen auf die Relaxationszeit T_1 eines Kernspins, der mit dem Kink-Gas wechselwirkt, und sollte deshalb auch in einem NMR Experiment nachzuweisen sein.

$1/T_1$ kann durch die Spinkorrelationsfunktion ausgedrückt werden (Richards 1976) und lautet in kartesischen Koordinaten (Benner 1983)

$$T_1^{-1} = \tau_0 \int_0^{\infty} dt \cos \omega_N t \sum_{\substack{\alpha=x,y,z \\ i,j}} \tilde{B}_{ij}^{\alpha} \langle S_{i,\alpha}(t) S_{j,\alpha}(0) \rangle \quad (3.22)$$

Die Indizes i, j numerieren die Gitterplätze, ω_N ist die NMR Frequenz (in Einheiten von $1/\tau_0$). Die Fouriertransformierten der Koeffizienten $\tilde{B}_{ij}^{\alpha}$ sind mit denen der Hyperfeinkoeffizienten $A_{ij}^{\alpha\beta}$ aus der Dipolwechselwirkung

$$H_{\text{dip}} = \sum_{\substack{\alpha,\beta \\ i,p}} S_{i,\alpha} A_{i,p}^{\alpha\beta} I_{p,\beta} \quad (3.23)$$

verknüpft. $\vec{I}_p$ ist ein Kernspin am Ort p . Es gilt (Benner 1983)

$$\tilde{B}_q^{\alpha} = \sum_{\beta=x,y} |A_q^{\alpha\beta}|^2 \quad (3.24)$$

Vernachlässigt man schließlich die q -Abhängigkeit von $\tilde{B}_q^{\alpha}$, erhält man

$$T_1^{-1} \approx \tau_0 \int_0^{\infty} dt \cos \omega_N t \sum_{\alpha} \tilde{B}_{q=0}^{\alpha} \langle S_{i,\alpha}(t) S_{i,\alpha}(0) \rangle \quad (3.25)$$

mit $\tilde{B}_0^x = \tilde{B}_0^y = 1.88 \omega_D^2$, $\tilde{B}_0^z \approx 0$, $\omega_D = 4.15$ MHz für Cs in CsNiF₃ (Benner 1983). Da wir uns für den Kink-induzierten Beitrag zu $1/T_1$ interessieren, drücken wir die Korrelationsfunktion durch ihre Fouriertransformierte aus Gl. (3.19) aus:

$$T_1^{-1} = 2\pi \sum_{\alpha} \tilde{B}_{q=0}^{\alpha} \int_{q>0} dq S_{\alpha\alpha}(q, \omega_N) \quad . \quad (3.26)$$

Der Term mit $\alpha = x$ liefert den größten Anteil, der andere maximal 10%. Über die Relation $q = \omega_N/u$ wird q in den Integralen substituiert. Die Integration über u ist natürlich auf den zulässigen Geschwindigkeitsbereich beschränkt. Der Integrand ist jetzt proportional zu $(1/u) n_k(u) |M_{\alpha\alpha}^k(q = \frac{\omega_N}{u}, u)|^2$ und enthält somit den zusätzlichen Faktor $1/u$, verglichen mit der ω -Integration (3.21) für die Intensität $I(\tilde{b})$. Dieser Term wichtet stark die niedrigen Geschwindigkeiten und ist eine Konsequenz aus der Tatsache, daß ein Kernspin nicht sehr effektiv mit einem Kink wechselwirken kann, wenn dieser zu schnell vorbeiläuft: Der Integrand, genauer gesagt die Funktion $(1/u) |M(u)|^2$, die für kleine u der am stärksten variierende Anteil darin ist, hat ein Maximum bei $\bar{u}/\delta \sim \omega_N$. Hier passen die Zeitskalen, die durch die NMR Frequenz bzw. durch die Kinkgeschwindigkeit gesetzt sind, am besten zueinander. Da der Hauptbeitrag zum Integral also von den kleinen Geschwindigkeiten herrührt, ist die Veränderung des zulässigen Bereichs an der oberen Grenze (bei u_C^A bzw. u_C^S) praktisch ohne Bedeutung: auch der Beitrag der durch die kritische Geschwindigkeit u_C^A limitierten Anregungen wächst, da ihre Dichte $n_A(u)$ steigt, bis u_C^A so klein wird (also $\tilde{b}$ sehr nahe bei $\tilde{b}_C$), daß sie vergleichbar mit $\bar{u}$ oder sogar kleiner wird. Dann sinkt der Beitrag auf Null.

Für $\tilde{b} > \tilde{b}_C$ tragen zum Integral nur noch Anregungen mit $u_{\min}^S < |u| < u_C^S$ bei. Wegen der endlichen Mindestgeschwindigkeit $u_{\min}^S$ entfällt der ehemals dominante Bereich niedriger Geschwindigkeiten. Die zum Integral inverse Relaxationszeit T_1 hat deshalb ein scharfes Minimum kurz vor $\tilde{b}_C$ und wächst dann rasch an, wie in Fig. 3.5 zu sehen ist. Die Daten sind auf den Wert von T_1 für $\tilde{b} = 0$ normiert: $T_1(0) = 1.4$ ms (zum Vergleich: für $T = 12$ K, $b = 10/54$ gilt im idealen sine-Gordon System $T_1^{SG} = 2.6$ ms). Für $b \rightarrow 0$ tendiert der Quotient T_1/T_1^{SG} erwartungsgemäß gegen eins). Die in den Rechnungen benutzte NMR Frequenz

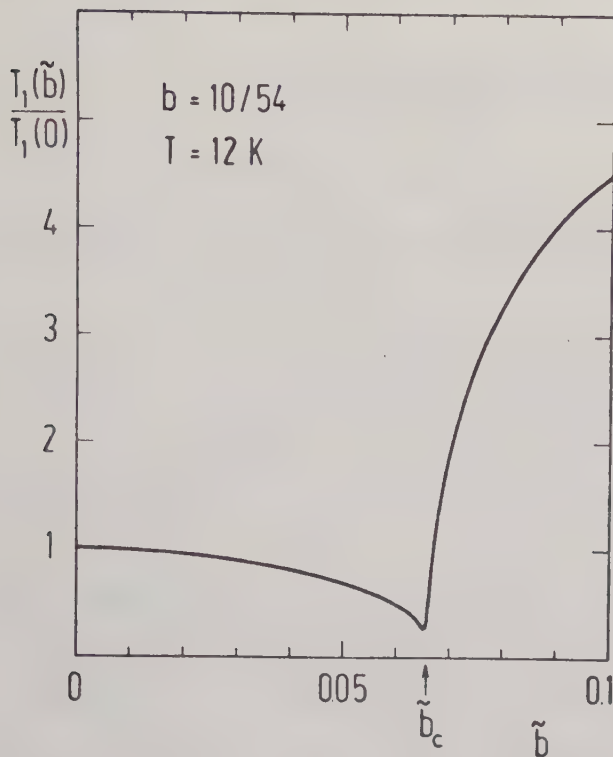


Fig. 3.5 Kink-induzierte Relaxationszeit T_1 als Funktion des Zusatzfeldes.

beträgt 35 MHz . Die Variation von T_1 ist natürlich auch bei anderen Werten von B und T sichtbar.

Zusammenfassend kann man feststellen, daß die Einführung des zusätzlichen äußeren Feldes, $\tilde{b}$, parallel zur harten Achse wiederum geeignet erscheint, um zu Aussagen über die nicht-linearen Anregungen des Systems, hier insbesondere über ihre Dispersionsrelation, zu gelangen.

TEIL II : ZUM PROBLEM VON CHAOS IN QUANTENSYSTEMEN

4. GIBT ES CHAOS IN QUANTENSYSTEMEN ?

4.1 Einfache Beispiele klassischer chaotischer Systeme

In diesem wie in den folgenden Kapn. (4.2 bis 4.4) werden die Grundlagen zur Diskussion des Problems von Chaos in Quantensystemen gelegt. Eigene Resultate sind in den Kapn. 4.4.3, 4.5.2 und 4.6 dargelegt und am Ende zusammengefaßt.

Wir beginnen mit der Einführung grundlegender Größen zur Charakterisierung von klassischem chaotischem Verhalten. Spezielle Quantensysteme werden ab Kap. 4.3.2 vorgestellt.

Betrachtet werden ausschließlich zeitdiskrete Abbildungen. Dies können z.B. stroboskopische (mit einer festen Frequenz aufgenommene) Bilder eines kontinuierlichen Flusses sein. Im Fall von Hamilton'schen Systemen gelangt man stets zu flächenerhaltenden Abbildungen, die mindestens zweidimensional sind. Nur solche Systeme sind quantisierbar und die Untersuchung spezieller Beispiele steht im Mittelpunkt von Teil II (s. Kap. 4.3 bis 4.6). Bei dissipativen Systemen erhält man Abbildungen, die nicht flächenerhaltend sind und auch eindimensional sein können. In Kap. 4.1 und 4.2 werden der Einfachheit halber die uns interessierenden Größen mit Hilfe eindimensionaler Abbildungen ohne direkten physikalischen Bezug eingeführt. Als erstes Beispiel betrachten wir die Abbildung

$$x_{n+1} = f(x_n) = a \left(1 - 2 \left| \frac{1}{2} - x_n \right| \right) \quad (4.1)$$

$$0 < a \leq 1 \quad , \quad x_n \in [0,1] \quad .$$

Sie wird anschaulicherweise auch Dreiecksabbildung genannt. Der Index n numeriert die Iterationen. Für $a < \frac{1}{2}$ gibt

es nur einen Fixpunkt x_F mit $f(x_F) = x_F$, nämlich den stabilen Fixpunkt $x_F = 0$. Für $a > \frac{1}{2}$ hat man zwei Fixpunkte, die aber beide instabil sind. Für $a = 1$ ist dies in der Fig. 4.1 gezeigt.

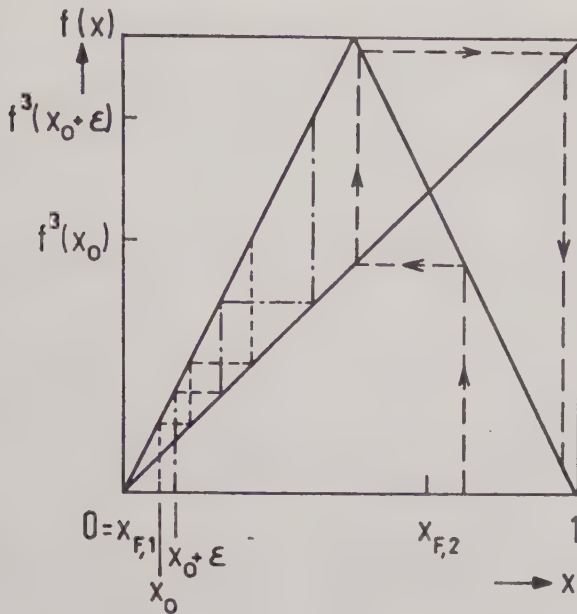


Fig. 4.1 Instabile Fixpunkte der Dreiecksabbildung $f(x)$; Separation benachbarter Punkte.

Die Abbildung weist drei wesentliche Merkmale auf:

- 1) Sie ist nichtlinear ("gebrochen linear");
- 2) unter der Abbildung wird (für $a > \frac{1}{2}$) ein Intervall der Länge ε gestreckt;
- 3) jeder Bildpunkt liegt wieder im Intervall $[0,1]$.

Das Auseinanderlaufen zweier benachbarter Punkte x_0 , $x_0 + \varepsilon$ ist in Fig. 4.1 dargestellt und wird quantitativ durch den Liapunov-Exponenten $\lambda(x_0)$ beschrieben: Man definiert zunächst die Größe

$$\lambda_n(x_0) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{n} \log \frac{|f^n(x_0 + \varepsilon) - f^n(x_0)|}{\varepsilon} = \frac{1}{n} \log \left| \frac{df^n(x_0)}{dx} \right| .$$

(4.2a)

Hierbei ist $f^n(x_0)$ die n-te Iterierte von x_0 (f wird n mal ausgeführt). Der Abstand zweier anfänglich eng benachbarter Punkte ist dann gegeben durch

$$|f^n(x_0 + \varepsilon) - f^n(x_0)| \approx \varepsilon e^{n \lambda_n(x_0)} . \quad (4.2b)$$

Den Liapunov-Exponenten erhält man als Grenzwert

$$\lambda(x_0) = \lim_{n \rightarrow \infty} \lambda_n(x_0) . \quad (4.3)$$

Da $f^2(x_0) = f(f(x_0))$, folgt mit Hilfe der Kettenregel

$$\frac{d}{dx} f'(x_0) = f'(x_1) f'(x_0) , \quad (4.4)$$

wobei nach (4.1) $x_1 = f(x_0)$ und analog

$$\frac{d}{dx} f^n(x_0) = \prod_{i=0}^{n-1} f'(x_i) . \quad (4.5)$$

So erhalten wir schließlich

$$\lambda(x_0) = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \sum_{i=0}^{n-1} \log |f'(x_i)| . \quad (4.6)$$

Nimmt man den Punkt $x_0 = 1/2$ aus der Betrachtung heraus, so ist für die Dreiecksabbildung der Liapunov-Exponent von x_0 unabhängig: $\lambda = \log 2a$. Die Variation eines Kontrollparameters a bewirkt hier also global den Umschlag der Dynamik von einem regulären ($a < \frac{1}{2}$: $\lambda < 0$, $x = 0$ stabiler Fixpunkt) zu einem chaotischen Verhalten ($a > \frac{1}{2}$: $\lambda > 0$, kein stabiler Fixpunkt, exponentielle Separation benachbarter Punkte). Im allgemeinen findet man im Phasenraum beide Typen von Bewegung, wobei die jeweiligen Bereiche kompliziert ineinander liegen können (Helleman 1983).

Eine Abbildung, die chaotisches Verhalten impliziert, ist auch dadurch charakterisiert, daß die Korrelation zwischen den Iterierten sehr rasch zerfällt. Dies soll exemplarisch anhand der Abbildung (Fig. 4.2)

$$x_{n+1} = (2 x_n) \bmod 1 \quad (4.7)$$

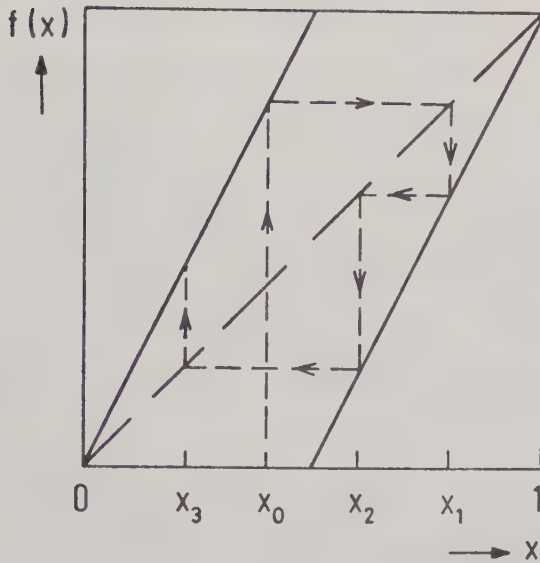


Fig. 4.2 Die Abb. (4.7); gezeigt werden die ersten drei Iterierten x_1, x_2, x_3 eines Startpunktes x_0 .

gezeigt werden. Diese beinhaltet sehr deutlich den für chaotisches Verhalten wichtigen Mechanismus des Streckens (anfängliche exponentielle Separation durch den Faktor 2) und des Zurückfältens (induziert durch die Nichtlinearität 'mod 1'). Diese reduziert die Größe $2x_n$ wieder auf das Intervall $[0,1]$, d.h. es werden nur die Stellen hinter dem Komma genommen). Der Liapunov-Exponent ist auch hier von x_0 unabhängig: $\lambda = \log 2$. Im folgenden soll nun die Korrelationsfunktion c_m berechnet werden.

$$c_m = \langle x_i x_{i+m} \rangle - \langle x_i \rangle^2 = \int_0^1 dx x f^m(x) - \frac{1}{4} \quad (4.8)$$

Zunächst bedeuten die eckigen Klammern den zeitlichen Mittelwert für eine Trajektorie, d.h.

$$\langle x_i \ x_{i+m} \rangle = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{i=0}^N f^i(x_0) f^{i+m}(x_0) \quad (4.8a)$$

$$\langle x_i \rangle = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{i=0}^N f^i(x_0) \quad . \quad (4.8b)$$

Da die Abbildung ergodisch ist (s. z.B. Schuster 1984), kann das Zeitmittel (Mittelung über die Iterationen) durch das Scharmittel (also Mittelung über den Phasenraum $[0,1]$) ersetzt werden. Im allgemeinen tritt bei der Berechnung des Scharmittels im Integral noch eine Größe $\rho(x)$ auf, die sogenannte invariante Dichte. Sie ist die Dichte der Iterierten im Phasenraum, definiert über

$$\rho(x) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{i=0}^N \delta(x - f^i(x_0)) \quad . \quad (4.9)$$

Für die betrachtete Abbildung (ebenso wie für die Dreiecksabbildung) ist sie eins. Das Integral in (4.8) wird aufgeteilt, da

$$f^m(x) = 2^m x - (n-1)$$

für

$$(n-1) \frac{1}{2^m} \leq x_0 \leq n \frac{1}{2^m} \quad (4.10)$$

und man erhält

$$c_m = \sum_{n=1}^{2^m} \int_{(n-1)/2^m}^{n/2^m} dx \ x \left\{ 2^m x - (n-1) \right\} - \frac{1}{4} \quad . \quad (4.11)$$

Nach Auswertung eines Integrals ergibt sich

$$c_m = \sum_{n=1}^{2^m} \frac{3n-1}{6 \cdot 2^{2m}} - \frac{1}{4} = \frac{1}{12 \cdot 2^m} \quad . \quad (4.12)$$

Die Korrelation zerfällt also exponentiell. Für die Dreiecksabbildung (mit $a = 1$) gilt sogar, daß die Iterierten delta-korreliert sind (s. z.B. Schuster 1984): $c_m = \frac{1}{12} \delta_{m,0}$.

4.2 Die Kolmogorov-Entropie

Der im letzten Abschnitt eingeführte Liapunov-Exponent ist eine klassische und i.a. lokale Größe (da er die Separation benachbarter Trajektorien mißt) und insofern kein Konzept, das auf quantenmechanische Systeme erweitert werden kann. Im folgenden soll daher die sogenannte Kolmogorov-Entropie vorgestellt werden, die zunächst ebenfalls als Indikator für klassische chaotische Bewegung dient. Ihre wahrscheinlichkeitstheoretische Definition legt den Versuch nahe, dieses Konzept auf quantenmechanische Systeme zu erweitern. Dies wird in Kap. 4.6 diskutiert. Beide Größen, die Kolmogorov-Entropie (abgekürzt K-Entropie) und der Liapunov-Exponent, hängen aber eng zusammen, wie Sinai (1966) und Pesin (1977) gezeigt haben. Die folgende Hinführung zum Begriff der K-Entropie (auch metrische Entropie (Farmer 1982a,b) oder Krylov-Kolmogorov-Sinai Entropie (Chirikov 1979) genannt) lehnt sich an die Arbeit von Kosloff und Rice (1981) an.

Wie in der Einleitung erwähnt, sind Systeme mit einer chaotischen Dynamik immer noch deterministisch. Wäre man in der Lage, die Anfangsbedingungen mit beliebiger Genauigkeit festzulegen, d.h. einen einzelnen Phasenpunkt zu verfolgen, könnte man keinen Unterschied zu regulären Systemen feststellen. Es ist daher sinnvoll, nur noch von der Wahrscheinlichkeit zu reden, mit der das System in einem Volumenelement des Phasenraums zu finden ist.

Wir beginnen also damit, daß wir den Phasenraum $\Gamma (\subset \mathbb{R}^d)$ in Zellen $\Omega_i^{(0)}$ einteilen. Dies definiert uns ein Ausgangsraster

$$P_0 = \left\{ \Omega_i^{(0)} \mid \bigcup \Omega_i^{(0)} = \Gamma, \Omega_i^{(0)} \cap \Omega_j^{(0)} = \emptyset \text{ für } i \neq j \right\}.$$

(4.13)

Anschaulich gesprochen stellen die Zellen die möglichen Ausgänge eines Experiments dar, das eben nur mit einer begrenzten Genauigkeit durchgeführt werden kann. Für dieses Raster läßt sich eine Informationsentropie $h(P_0)$ definieren: sei

W_i die Wahrscheinlichkeit, das System in einer Zelle $\Omega_i^{(0)}$ zu finden. So ist

$$h(P_0) = - \sum_i W_i \log W_i \quad (4.14)$$

gerade die Information (bis auf einen Faktor $1/\log 2$), die man gewinnt, wenn man (durch ein Experiment) erfährt, das System ist in einer speziellen Zelle $\Omega_i^{(0)}$ (und vorher nur die Wahrscheinlichkeiten der möglichen Ausgänge des Experiments kannte). Dies soll an einem einfachen Beispiel illustriert werden: Bei einem Würfel treten die möglichen Elementarereignisse mit einer Wahrscheinlichkeit $1/6$ auf. Interessiert man sich nun für die Frage, ob eine gerade oder ungerade Zahl gewürfelt wird (dies entspricht der Rasterung des Phasenraums), so gilt für die entsprechenden Wahrscheinlichkeiten $W_g = W_u = 1/2$. Wenn man diesbezüglich den Ausgang des Würfels erfährt, so ist der Informationsgewinn

$$I = - W_g \log W_g - W_u \log W_u = - 2 \frac{1}{2} \log \frac{1}{2} = 1 \quad (4.15)$$

Man spart genau eine Frage ("gerade" oder "ungerade"). Der Informationsgewinn beträgt ein bit.

Jetzt müssen noch die W_i in (4.14) spezifiziert werden. Man definiert

$$W_i = \int_{\Omega_i^{(0)}} dx \rho(x) \quad , \quad x \in \Gamma \quad (4.16)$$

Die darin enthaltene Dichte $\rho(x)$ wichtet u.U. gleich große Zellen durchaus verschieden. Dies muß erlaubt sein, so wie man ja auch in der Gleichgewichtsthermodynamik Zustände hoher Energie geringer wichtet als solche mit niedriger Energie. $\rho(x)$ ist eine zusätzliche Information, die wir über das System erlangt haben: Es kann z.B. die Gleichgewichtsverteilung sein, wenn wir von dem System wissen, daß es sich im thermodynamischen Gleichgewicht befindet. Oder es kann die in Gl. (4.9) für zeitdiskrete Abbildungen definierte invariante

Dichte sein, die man kennt, wenn man aufeinanderfolgende Iterierte hinreichend lange registriert. Die Entropie h_0 hängt also sowohl von der Rasterung P_0 als auch von $\rho(x)$ ab.

Wenden wir uns jetzt der Dynamik des Systems zu, die durch die (d -dimensionale) Abbildung

$$x_{n+1} = f(x_n) \quad , \quad x \in \Gamma \quad (4.17)$$

gegeben ist (dies können, wie gesagt, die stroboskopischen Bilder eines kontinuierlichen Flusses sein). Ist die Dynamik chaotisch, so separieren benachbarte Punkte einer Zelle exponentiell. Die Bilder dieser Zelle werden im Laufe der Zeit Überlappungen mit immer mehr Zellen des Rasters P_0 aufweisen. Diese Überlappungen müssen i.a. nicht zusammenhängen. Dieses "Zerfasern" der Zelle führt zu einer positiven K-Entropie und soll im folgenden mathematisch formuliert werden.

Nach einem Zeitschritt ergibt sich aus einer Zelle $\Omega_i^{(0)}$ gemäß (4.17) das Bild

$$\Omega_i^{(1)} = f(\Omega_i^{(0)}) = \left\{ x_1 \mid x_1 = f(x_0), x_0 \in \Omega_i^{(0)} \right\} \quad . \quad (4.18)$$

Die Menge aller $f(\Omega_i^{(0)})$ sei mit $f(P_0)$ bezeichnet. Das Experiment wird wiederholt: Man erfährt so, daß das System sich jetzt in einer Zelle $\Omega_{i_2}^{(0)}$ (der Index an der Zellennummer kennzeichnet die zeitliche Abfolge) des Rasters P_0 (!) befindet. Vor diesem Experiment konnte man nur die Wahrscheinlichkeit dafür angeben, daß das System einen Weg von $\Omega_{i_1}^{(0)}$ nach $\Omega_{i_2}^{(0)}$ wählt, nämlich

$$W(f(\Omega_{i_1}^{(0)}) \cap \Omega_{i_2}^{(0)}) = W_{i_1 i_2} = \int_{f(\Omega_{i_1}^{(0)}) \cap \Omega_{i_2}^{(0)}} dx \rho(x) \quad . \quad (4.19)$$

Die Menge aller dieser Durchschnitte stellt i.a. eine feinere Aufteilung des Phasenraums dar (Fig. 4.3) und definiert das Verbundraster ('joint partition')

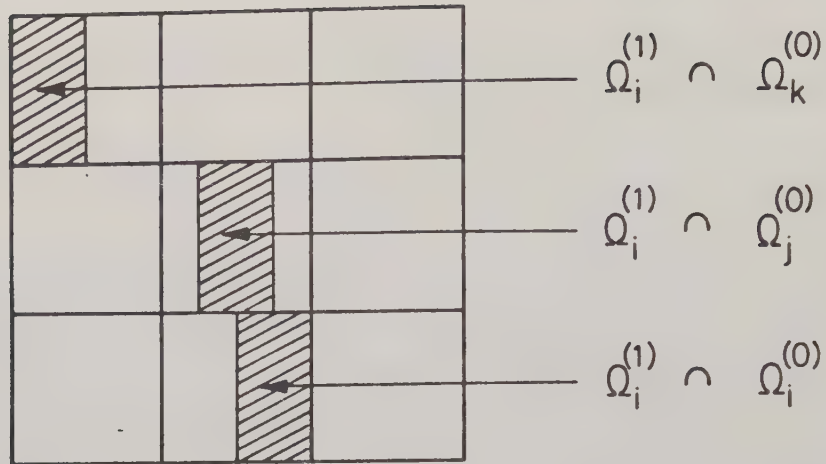


Fig. 4.3 Rasterung des Phasenraums in neun Zellen; schraffiert gezeichnet ist das Bild $f(\Omega_i^{(0)})$ einer einzigen (herausgegriffenen) Zelle $\Omega_i^{(0)}$ (die Dichte $\rho(x)$ sei homogen).

$$P_1 = f(P_0) \wedge P_0 = \left\{ \Omega_i^{(1)} \cap \Omega_j^{(0)} \quad \forall i, j \right\} \quad (4.20a)$$

Dieses Verfahren läßt sich fortsetzen

$$\begin{aligned} P_2 &= f^2(P_0) \wedge f(P_0) \wedge P_0 = f \left(f(P_0) \wedge P_0 \right) \wedge P_0 = f(P_1) \wedge P_0 \\ &= \left\{ \Omega_i^{(2)} \cap \Omega_j^{(1)} \cap \Omega_k^{(0)} \right\} \end{aligned} \quad (4.20b)$$

und die Wahrscheinlichkeit für die Sequenz der Meßergebnisse $\Omega_{i_1}^{(0)}, \Omega_{i_2}^{(0)}, \Omega_{i_3}^{(0)}$ ist gegeben durch

$$W_{i_1 i_2 i_3} = \int_{f^2(\Omega_{i_1}^{(0)}) \cap f(\Omega_{i_2}^{(0)}) \cap \Omega_{i_3}^{(0)}} dx \rho(x) \quad (4.21)$$

Sie ist nur dann von Null verschieden, wenn das Bild der Zelle $\Omega_{i_1}^{(0)}$ nach einem Zeitschritt einen nichtverschwindenden Durchschnitt mit $\Omega_{i_2}^{(0)}$ besitzt. Das Bild dieses Durchschnitts muß nach der nächsten Iteration mit $\Omega_{i_3}^{(0)}$ überlappen. (Es sei an dieser Stelle noch einmal betont, daß es nicht nötig ist, die

die genaue Trajektorie des Systems zu kennen!) Enthalten die Verbundraster P_n mit wachsendem n immer mehr dieser Durchschnitte, so spiegelt dies die Zerfaserung der Zelle wider.

Über die Wahrscheinlichkeiten $W_{i_1 \dots i_n}$ läßt sich wieder eine Entropie definieren, die sowohl von der Dynamik f als auch von der Rasterung P_0 (und der Dichte ρ) abhängt

$$\tilde{h}_n(f, P_0) = - \sum_{i_1 \dots i_n} W_{i_1 \dots i_n} \log W_{i_1 \dots i_n} \quad (4.22)$$

Zum einen ist $\tilde{h}_n$ diejenige Information, die man gewinnen würde, wenn man das System in einem bestimmten Durchschnitt des Verbundrasters P_n lokalisieren könnte. Da aber jedes der n durchgeführten Experimente stets nur eine Aussage über die Lokalisierung innerhalb des Ausgangsrasters P_0 macht, ist es sinnvoller zu sagen, $\tilde{h}_n$ ist diejenige Information, die man gewinnt, wenn man die Ausgänge der n Experimente (also eine spezielle Sequenz) kennt. Um diese Sequenz vorhersagen zu können, muß man genau diese Information $\tilde{h}_n$ zu Beginn besitzen, d.h. das System muß anfangs sehr viel genauer lokalisiert werden, als dies über die Aussage 'es ist in einer speziellen Zelle aus P_0 ' geschieht. Die Zellen dieser feineren Startrasterung sind durch $f^{-n}(f^n(\Omega_{i_1}^{(0)}) \cap f^{n-1}(\Omega_{i_2}^{(0)}) \cap \dots \cap \Omega_{i_n}^{(0)})$ gegeben, also durch die Urbilder der Durchschnitte von P_n . In den Fällen, wo

$$\int_{f(\Omega)} \rho(x) dx = \int_{\Omega} \rho(x) dx$$

gilt, ist die Wahrscheinlichkeit, das System in einer solchen Zelle zu finden, identisch mit $W_{i_1 \dots i_n}$. (Dies trifft auf Hamiltonsche Systeme zu, aber z.B. nicht auf die in Kap. 4.1 diskutierten eindimensionalen Abbildungen (Gln. (4.1), (4.7)). Dies liegt daran, daß eine Zelle $\Omega_i^{(0)}$ der entsprechenden Phasenraumrasterung P_0 , also ein Teilintervall von $[0,1]$, auf jeden Fall gestreckt wird (d.h. $f(\Omega_i^{(0)})$ stellt ein größeres Teilintervall dar als $\Omega_i^{(0)}$, aber $\rho(x) \equiv 1$). Insgesamt liegt natürlich wieder jeder Bildpunkt in $[0,1]$. Dies führt dazu, daß jeder Bildpunkt zwei Urbilder hat (dies wi-

derspricht nicht der Determiniertheit, da sich der Bildpunkt dann eindeutig weiterentwickelt). Dementsprechend sind die Durchschnitte $f(\Omega_i^{(0)}) \cap \Omega_j^{(0)}$, die man für alle i, j bilden muß, nicht mehr paarweise elementfremd. Die Menge aller dieser Durchschnitte stellt kein Verbundraster des Phasenraums mehr dar. Dennoch läßt sich ein feineres Raster auch in diesen Fällen definieren, indem man direkt die Frage stellt, wie genau muß ich einen Punkt lokalisieren, um den Ausgang von n Iterationen vorhersagen zu können. Dies entspricht dem ursprünglichen Vorgehen von Kolmogorov, siehe Halmos (1977).)

Ist jetzt $\tilde{h}_{n+1} > \tilde{h}_n$, so genügt die n -malige Durchführung eines Experiments nicht, um den Ausgang des folgenden zu bestimmen: es fehlt die Information $\tilde{h}_{n+1} - \tilde{h}_n$. Die Zahl der Durchschnittsmengen (also die Zerfaserung der Zelle) nimmt in jedem Schritt zu. Anders gesagt, die Genauigkeit in den Anfangsbedingungen, die ausreichend war, um n Iterationen vorherzusagen, reicht nicht aus für $n + 1$ Iterationen (vgl. das Beispiel am Ende des Kap.). Wächst $\tilde{h}_n$ hinreichend schnell, ist

$$h(P_0, f) = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \tilde{h}_n \quad (4.23)$$

von Null verschieden. Die Größe $h(P_0, f)$ bezeichnet man auch als mittlere Informationsentropie. Es ist diejenige Information, die man im Mittel pro Zeitschritt nachliefern muß, um das System im Phasenraum (innerhalb der Präzision des Rasters P_0) zu lokalisieren, wie auch aus der Umformung

$$h(P_0, f) = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \sum_{i=0}^{n-1} (\tilde{h}_{i+1} - \tilde{h}_i) \quad (4.24)$$

hervorgeht. Um von der speziellen Rasterung unabhängig zu werden, bildet man das Supremum hinsichtlich P_0 und definiert dies als Kolmogorov-Entropie

$$h_K(f) = \sup_{P_0} h(P_0, f) \quad (4.25)$$

Zwei Feststellungen sind wichtig:

- 1) Wie schon gesagt, ist die K-Entropie dann positiv, wenn das System chaotisch ist, d.h. wenn die Verbundrasterung

immer feiner wird ($\tilde{h}_n$ mindestens $\propto n$). Ist die Bewegung des Systems dagegen periodisch, verschwindet die K-Entropie. Sei die Periode $\tilde{n}$, also $f^{\tilde{n}} \equiv 1$, so ist

$$\begin{aligned} P_{\tilde{n}} &= f^{\tilde{n}}(P_0) \wedge f^{\tilde{n}-1}(P_0) \wedge \dots \wedge P_0 \\ &= P_0 \wedge f^{\tilde{n}-1}(P_0) \wedge \dots \wedge P_0 \end{aligned} \quad (4.26)$$

Von jetzt ab wiederholt sich das Muster lediglich, das Verbundraster wird nicht mehr feiner. Ich benötige auch keine neue Information mehr. Die Informationsentropie erreicht also lediglich einen maximalen Wert $h_{\max}$, so daß $h(P, f) = \lim_{n \rightarrow \infty} h_{\max}/n = 0$. Da dies für alle möglichen Rasterungen P_0 gilt, verschwindet auch die K-Entropie.

- 2) Die eingangs erwähnte Verbindung zwischen der K-Entropie und den Liapunov-Exponenten einer d-dimensionalen Abbildung (Pesin 1977, Sinai 1966) lautet

$$h_k(f) = \sum_{\lambda_i > 0} \int dx \lambda_i(x) \rho(x) \quad (4.27)$$

Die Summe erstreckt sich nur über positive λ . Die Definition des Liapunov-Exponenten einer eindimensionalen Abbildung ist dabei auf d Dimensionen erweitert worden: Aus (4.6) folgt

$$e^{\lambda(x_0)} = \lim_{n \rightarrow \infty} \left\{ \prod_{i=0}^{n-1} |f'(x_i)| \right\}^{1/n} \quad (4.28)$$

Liegt eine d-dimensionale Abbildung $f = (f_1, \dots, f_d)$ vor, so wird die Ableitung in (4.28) durch die Eigenwerte $\tilde{\lambda}_v(x)$ der Jakobimatrix $J = \left(\frac{\partial f_i}{\partial x_j} \right)$ ersetzt. (J geht in die Tangentialabbildung ein

$$\xi_{n+1} = J(x_n) \xi_n \quad (4.29)$$

mit $|\xi_n| = |x'_n - x_n| \ll 1$. Diese in ξ lineare Abbildung ermöglicht eine Aussage über die lokale Stabilität.)

Man definiert

$$e^{\lambda_v(x_0)} = \lim_{n \rightarrow \infty} \left\{ \prod_{i=0}^{n-1} |\tilde{\lambda}_v(x_i)| \right\}^{1/n}. \quad (4.30)$$

Daß in der Berechnung der K-Entropie nur die positiven Liapunov-Exponenten auftreten, erscheint plausibel, da nur sie die Separation zweier benachbarter Punkte und damit das Zerfasern der Zelle beschreiben.

Im folgenden soll das beschriebene Verfahren zur Bestimmung der K-Entropie sowie die Gültigkeit der Relation (4.27) in zwei Beispielen verdeutlicht werden. Die betrachteten Abbildungen sind insofern einfach, da sie eindimensional sind (keine Summation in (4.27) erforderlich) und der Liapunov-Exponent nicht von x_0 abhängt (keine Phasenraummittelung in (4.27)). Im nächsten Kapitel wird im Rahmen der Diskussion des gekickten Pendels die K-Entropie einer zweidimensionalen Abbildung berechnet, wobei von der verallgemeinerten Definition des Liapunov-Exponenten (Gl. (4.30)) Gebrauch gemacht wird.

In den nun folgenden Beispielen wird der Kreis (Intervall $[0,1]$, wobei 0 und 1 identifiziert werden können) auf sich selbst abgebildet.

$$1) \quad x_{n+1} = (x_n + b) \bmod 1 = f_1(x_n). \quad (4.31)$$

Die Abbildung induziert eine Translation auf dem Kreis. Für rationales b ist die Abbildung periodisch. Die K-Entropie verschwindet dann nach dem oben Gesagten. Für irrationales b wächst die Zahl der Durchschnitte N_n , der Elemente des Verbundrasters, linear mit der Anzahl der Iterationen: $N_n = (n+1) N_0$ (Fig. 4.4). Wir erhalten somit

$$\tilde{h}_n(P_0, f_1) = - \sum_{K=1}^{N_n} \frac{1}{N_n} \log \frac{1}{N_n} = \log (n+1) N_0.$$

und

$$h(P_0, f_1) = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \log (n+1) N_0 = 0.$$

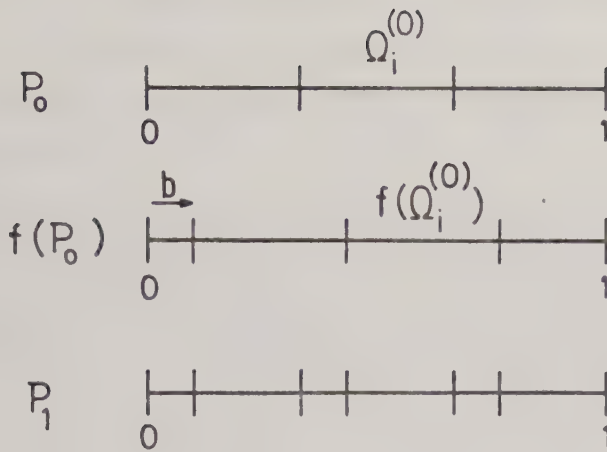


Fig. 4.4 Das Verbundraster für die Translation auf dem Kreis.

Da dies für jede Einteilung gilt, verschwindet auch die K-Entropie in Übereinstimmung mit (4.27), denn aus $f_1(x) = 1$ folgt, daß der Liapunov-Exponent Null ist.

2) Wir betrachten die schon bekannte Abbildung (4.7)

$$x_{n+1} = (2 x_n) \bmod 1 = f_2(x_n) \quad . \quad (4.32)$$

Denkt man sich x_n binär dargestellt, so induziert diese Abbildung eine sogenannte Bernoulliverschiebung: alle binären Stellen werden um eine nach links verschoben, die allererste Stelle (die jetzt vor dem Komma steht würde) entfällt (da $x \in [0,1]$). Das Intervall $[0,1]$ wird in die Teilintervalle $L = [0, \frac{1}{2}]$ und $R = [\frac{1}{2}, 1]$ unterteilt. Dies stellt das Ausgangsraster P_0 dar. Die Wahrscheinlichkeit dafür, x_0 in L oder R zu finden, ist gleich groß: $h_0 = -2 \frac{1}{2} \log \frac{1}{2} = \log 2$. Dies ist die Information, die man gewinnt, wenn man Kenntnis über die erste binäre Stelle a_1 erlangt (a_1 ist 0 oder 1). Um noch nach n Iterationen sagen zu können, ob $x_n = f_2^n(x_0)$ in L oder R fällt, muß man x_0 auf $n+1$ binäre Stellen a_i genau kennen, d.h. ich benötige $n+1$ mal die Information ' a_i ist 0 oder 1'. Damit ist

$\tilde{h}_n(P_0, f_2) = (n+1) \log 2$. Dies liefert das gewünschte Ergebnis $h_k(f_2) = \log 2$. (Eine feinere Einteilung P_0 führt nur zu einem anderen konstanten Term in $\tilde{h}_n$: Zerlegt man $[0,1]$ in 2^N Zellen, so muß man jede Zahl x_0 auf $n+N$ binäre Stellen bestimmen, um vorhersagen zu können, in welche Zelle aus P_0 sie nach n Iterationen fällt.) Dies Beispiel zeigt deutlich, daß hier die Kenntnis von n Iterationen nicht ausreicht, um den Ausgang der nächsten zu bestimmen. Dazu benötigt man die zusätzliche Information $\tilde{h}_{n+1} - \tilde{h}_n = \log 2$, d.h. x_0 muß um eine binäre Stelle mehr bekannt gewesen sein.

4.3 Der gekickte Rotator

Nachdem in den beiden vorangegangenen Abschnitten die grundlegenden Größen zur Quantifizierung chaotischen Verhaltens bei einfachen mathematischen Abbildungen studiert worden sind, soll jetzt ein System mit physikalischem Bezug vorgestellt werden, der sogenannte gekickte Rotator. Dieses Modell besitzt den großen Vorzug, daß man aus den klassischen Bewegungsgleichungen leicht eine diskrete Abbildung herleiten kann. Von besonderem Interesse wird das Verhalten des quantisierten Systems sein, das sich drastisch vom klassischen unterscheidet.

4.3.1 Chaotische Bewegung im klassischen System

Beginnen wir mit der Herleitung der diskreten Abbildung, ausgehend von der explizit zeitabhängigen Hamiltonfunktion

$$H = \frac{p^2}{2I} + V(\theta) \sum_n \delta\left(\frac{t}{T} - n\right) . \quad (4.33)$$

Sie beschreibt die auf die x, y -Ebene beschränkte Bewegung eines Pendels (Masse m , Länge l , Trägheitsmoment $I = m l^2$)

unter dem Einfluß periodisch auftretender Kraftstöße mit der Amplitude $-\frac{dV(\theta)}{d\theta}$. Das Potential $V(\theta)$ wird mit der Periode T für kurze Zeit angeschaltet, dazwischen ist die Bewegung des Systems frei. Die z-Komponente des (Dreh-) Impulses ist mit p , der Winkel (in der Ebene) mit θ bezeichnet.

Die Hamilton'schen Bewegungsgleichungen lauten

$$\dot{p}(t) = -\frac{dV}{d\theta} T \sum_n \delta(t-nT) \quad (4.34)$$

$$\dot{\theta}(t) = p(t)/I$$

Um zu einer diskreten Abbildung zu gelangen, integriert man die Gleichungen zwischen $nT - \varepsilon$ und $(n+1)T - \varepsilon$ (es ist also gerade ein Stoß enthalten; der erste Stoß erfolgt bei $n = 0$; p_0 und θ_0 sind die Anfangsbedingungen vor diesem Stoß). Das Ergebnis lautet

$$p_{n+1} - p_n = -T \left. \frac{dV}{d\theta} \right|_{\theta=\theta_n} \quad (4.35)$$

$$\begin{aligned} \theta_{n+1} - \theta_n &= \left(p_n - T \left. \frac{dV}{d\theta} \right|_{\theta=\theta_n} \right) \frac{T}{I} \\ &= p_{n+1} \cdot \frac{T}{I}, \end{aligned}$$

wobei $x_n = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} x(t=nT-\varepsilon)$. Bei der zweiten Gleichung wurde verwendet, daß der Impuls nach dem Kraftstoß zur Zeit nT konstant, und zwar p_{n+1} , ist. Die Wertepaare (θ_n, p_n) kann man als stroboskopische Bilder des Systems auffassen, wobei die 'Beleuchtungsfrequenz' hier sinnvoll mit $1/T$ vorgegeben ist.

Mit $V(\theta) = -V_0 \cos \theta$ und der Definition von $\tilde{p} = p T/I$, erhält man die sogenannte Standard- oder Chirikov-Abbildung:

$$\begin{aligned}\tilde{p}_{n+1} &= \tilde{p}_n - k \sin \theta_n \\ \theta_{n+1} &= \theta_n + \tilde{p}_{n+1}\end{aligned}\tag{4.36}$$

mit

$$k = V_0 T^2/I \quad .$$

Sie wird detailliert in einem Übersichtsartikel von Chirikov (1979) erörtert, ebenso in der Arbeit von Casati et al. (1979) (hier ist zum erstenmal auch das quantenmechanische System behandelt). Einige wesentliche Resultate sollen im folgenden vorgestellt werden:

- 1) Die Chirikov-Abbildung ist eine zweidimensionale, nicht-lineare Abbildung vom Typ

$$\vec{x}_{n+1} = \vec{f}(\vec{x}_n)\tag{4.37}$$

mit

$$\begin{aligned}\vec{x}_n &= (\tilde{p}_n, \theta_n) \quad \text{und} \quad \vec{f} = (f_1, f_2) , \\ f_1 &= \tilde{p}_n - k \sin \theta_n , \\ f_2 &= \theta_n + \tilde{p}_n - k \sin \theta_n .\end{aligned}$$

- 2) Die Dynamik (4.36) erlaubt für $k \gg 1$ eine deterministische Diffusion des Impulses, d.h. die mittlere quadratische Abweichung vom Anfangsimpuls wächst linear mit der Zeit (hier also mit der Zahl der Iterationen). Im Gegensatz zum 'random walk' eines Brown'schen Teilchens wird die Diffusion nicht durch (externe) stochastische Kräfte, sondern durch die (intrinsische) Dynamik des Systems verursacht: Aus Gl. (4.36) erhält man

$$\tilde{p}_{n+1} - \tilde{p}_0 = \sum_{i=0}^n (\tilde{p}_{i+1} - \tilde{p}_i) = -k \sum_i \sin \theta_i \tag{4.38a} .$$

Somit ergibt sich für das über alle Anfangslagen gemittelte Quadrat dieser Größe

$$\langle \tilde{p}_{n+1}^2 \rangle - \tilde{p}_0^2 = k^2 \sum_{i,j} \langle \sin \theta_i \sin \theta_j \rangle, \quad (4.38b)$$

wobei $\langle (\tilde{p}_{n+1} - \tilde{p}_0)^2 \rangle = \langle \tilde{p}_{n+1}^2 \rangle - \tilde{p}_0^2$ ausgenutzt wurde (folgt auch aus (4.38a)). Unter der Annahme, daß bereits aufeinanderfolgende Iterierte unkorreliert sind (die Kurzreichweitigkeit der zeitlichen Korrelation ist ja typisch für chaotische Bewegung, vgl. Kap. 4.1), folgt

$$\langle \tilde{p}_{n+1}^2 \rangle - \tilde{p}_0^2 = k^2 n \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\theta_0 \sin^2 \theta_0 = n \frac{k^2}{2}. \quad (4.38c)$$

Sowohl das Zeitgesetz als auch der Diffusionskoeffizient sind für hinreichend große k numerisch bestätigt (Chirikov 1979, Casati et al. 1979), indem man statt des Scharmittels $\langle \dots \rangle$ eine Trajektorie ausreichend lang verfolgt, d.h. das Zeitmittel ausführt. Man findet, daß beide dasselbe Resultat liefern, also

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} (\tilde{p}_{n+1} - \tilde{p}_0)^2 = k^2/2.$$

Das System ist fast ergodisch (siehe unten).

- 3) Numerisch konnte gezeigt werden (Chirikov 1979), daß für $k > 4$ das System bei fast allen Anfangsbedingungen chaotisches Verhalten zeigt (exponentielle Separation benachbarter Trajektorien und dichtes Überstreichen des zugänglichen Phasenraums - wegen des Zurückfaltens - durch eine einzelne Trajektorie). Es verbleiben im Phasenraum nur noch wenige Bereiche mit regulärem Verhalten ('Inseln der Stabilität'). Da die 'chaotischen' Trajektorien in diese Inseln nicht hineingelangen können, ist das System nicht ergodisch. Für praktische Zwecke kann man aber dennoch das Zeitmittel durch das Scharmittel ersetzen, z.B. um die Kolmogorov-Entropie zu berechnen (siehe unten) oder bei der Ermittlung der Impulsdiffusion. In Teilbereichen des Phasenraums (in der Nähe des instabilen Fixpunkts $\theta = \pi$, $p = 0$) setzt chaotisches Verhalten allerdings schon bei

$k \sim 1$ ein (auch diese Stabilitätsgrenze wurde numerisch ermittelt). Große Teile des Phasenraums bleiben aber noch für diese Trajektorien verboten, das System ist hier auch nicht annähernd ergodisch. Für $k < 1$ findet man nur reguläre Bewegung, alle Trajektorien sind (ohne daß sie zurückgefaltet werden) auf einen endlichen Bereich im Phasenraum beschränkt: es findet keine Impulsdiffusion statt.

- 4) Eine quantitative Aussage über das Ausmaß chaotischer Bewegung erhält man mit Hilfe der Kolmogorov-Entropie, die über die Relation (4.27) berechnet werden soll. Dazu muß man zunächst die Liapunov-Exponenten ermitteln. Dazu muß nach (4.30) entsprechend werden die Eigenwerte $\tilde{\lambda}_{1,2}(\theta)$ der Jakobimatrix $J(\theta)$ der Abbildung (4.37) berechnet:

$$J(\theta) = \begin{pmatrix} 1 & -k \cos \theta \\ 1 & 1 - k \cos \theta \end{pmatrix} \quad (4.39)$$

und

$$\tilde{\lambda}_{1,2}(\theta) = \left(1 - \frac{k \cos \theta}{2}\right) \pm \sqrt{\left(1 - \frac{k \cos \theta}{2}\right)^2 - 1} \quad (4.40)$$

mit $\tilde{\lambda}_1 \cdot \tilde{\lambda}_2 = 1 = \det J$. (Die Abbildung ist flächenerhaltend.)

Für $k > 4$ erlaubt die (Fast-) Ergodizität des Systems, das Zeitmittel zur Berechnung des Liapunov-Exponenten durch das Scharmittel (= Mittelung über alle Anfangslagen θ in diesem Fall) zu ersetzen: λ wird dann unabhängig von den Anfangsbedingungen

$$\lambda_{\geq} = \langle \log |\tilde{\lambda}_{\geq}(\theta)| \rangle = \int d\theta \rho(\theta) \log |\tilde{\lambda}_{\geq}(\theta)|, \quad (4.41)$$

wobei $|\tilde{\lambda}_{\geq}| > 1$, $|\tilde{\lambda}_{\leq}| < 1$ sein soll. Für die K-Entropie erhält man dann $h_K = \lambda_{\geq}$. Nimmt man an, daß $k|\cos \theta| \gg 1$ so folgt aus (4.40)

$$\begin{aligned} \tilde{\lambda}_1 &\approx 0 = \tilde{\lambda}_{\leq} \\ \tilde{\lambda}_2 &\approx -k \cos \theta = \tilde{\lambda}_{\geq} \end{aligned} \quad (4.42)$$

und

$$h_k = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\theta \log(k |\cos \theta|) = \log \frac{k}{2} \quad (4.43) \quad .$$

Für $k \gg 1$ ist diese Näherung numerisch bestätigt (indem man wie bei der Ermittlung des Diffusionskoeffizienten wieder das Zeitmittel ausführt).

- 5) Wie schon bei den in Abschn. 4.1 diskutierten Abbildungen entscheidet auch hier die Größe eines Kontrollparameters k darüber, ob die Bewegung chaotisch verläuft oder nicht. Handelt es sich bei dem periodisch angeschalteten Potential um das Gravitationspotential, also $V_0 = m g \ell$, so bleibt für ein Pendel mit fester Länge ℓ (im konstanten Gravitationsfeld g) nur die Periode T als freie Variable zur Veränderung von k übrig, da k dann nicht von der Masse m abhängt. Für $T \rightarrow 0$ ist die Schwerkraft stets wirksam, und man erhält den integrablen Grenzfall eines Pendels im Gravitationsfeld mit den bekannten Trajektorien im Phasenraum.

4.3.2 Fastperiodisches Verhalten des quantenmechanischen Systems

Ausgangspunkt der quantenmechanischen Beschreibung ist der Übergang von der Hamiltonfunktion (4.33) zum Hamiltonoperator

$$H = \begin{cases} p^2/2I & \text{für} & nT < t < (n+1)T - \gamma \\ p^2/2I + \frac{V(\theta) T}{\gamma} & \text{für} & (n+1)T - \gamma < t < (n+1)T \end{cases} \quad (4.47)$$

mit
$$p = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{d\theta} \quad .$$

Das Potential wird also während eines Zeitintervalls γ mit einer Amplitude V_0/γ eingeschaltet: Dies ersetzt (für $\gamma \rightarrow 0$) die δ -Funktion aus (4.33). Die zeitliche Entwicklung der Wellenfunktion während einer Periode T (ein Kick ist gerade enthalten) ist gegeben durch

$$\psi(t=(n+1)T) = U((n+1)T, nT) \psi(t=nT) \quad (4.48)$$

mit dem Zeitentwicklungsoperator

$$\begin{aligned} U &= \lim_{\gamma \rightarrow 0} \left\{ e^{-\frac{i}{\hbar} \left(\frac{p^2}{2I} + \frac{V(\theta)T}{\gamma} \right) \gamma} e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2I} (T-\gamma)} \right\} \\ &= e^{-\frac{i}{\hbar} V(\theta)T} e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2I} T} \end{aligned} \quad (4.49)$$

Die Manipulation im ersten Exponenten entspricht der Vernachlässigung der kinetischen Energie während des Stoßes und setzt voraus, daß ihr Verhalten regulär bleibt (vgl. Abschn. 4.4.3).

Von besonderem Interesse ist jetzt die Frage, ob auch das Quantensystem chaotisches Verhalten zeigt. Als einziges Charakteristikum dafür steht uns im Augenblick nur die Diffusion des Impulses zur Verfügung. Also muß man in Analogie zu (4.38) die Größe $\langle p^2 \rangle_n - \langle p^2 \rangle_0$ untersuchen, wobei $\langle p^2 \rangle_n$ der quantenmechanische Erwartungswert

$$\langle p^2 \rangle_n = \int_0^{2\pi} d\theta \psi_n^*(\theta) \left(-\hbar^2 \frac{d^2}{d\theta^2} \right) \psi_n(\theta) \quad (4.50)$$

ist, mit $\psi_n = \psi(t=nT)$. Dazu ist es zweckmäßig, die Wellenfunktion nach den Impulseigenfunktionen, den ebenen Wellen $\varphi_v = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{iv\theta}$, zu entwickeln: $\psi_n = \sum_v c_v^n \varphi_v$.

Da die Wellenfunktion eindeutig sein muß ($\psi(\theta) = \psi(\theta+2\pi)$), sind nur ganzzahlige v zugelassen mit $-\infty < v < \infty$. Aus (4.48) und (4.49) erhält man dann die zeitliche Entwicklung der Fourierkoeffizienten c_v^n :

$$c_u^{n+1} = \sum_v c_v^n e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{\hbar^2 v^2}{2I} T} \langle u | e^{-\frac{i}{\hbar} V(\theta)T} | v \rangle \quad (4.51)$$

Mit $V(\theta) = -V_0 \cos \theta$ ergibt das Matricelement

$$\begin{aligned} \langle \mu | e^{\frac{i}{\hbar} V_0 T \cos \theta} | \nu \rangle &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{i(\nu-\mu)\theta + i/\hbar V_0 T \cos \theta} \\ &= i^{|\mu-\nu|} J_{|\mu-\nu|} \left(\frac{V_0 T}{\hbar} \right) . \quad (4.52) \end{aligned}$$

$J_\lambda(x)$ ist die Besselfunktion (erster Art) der Ordnung λ (Abramowitz und Stegun 1972). Der Erwartungswert (4.50) reduziert sich dann auf die einfache Form:

$$\langle p^2 \rangle_n = \hbar^2 \sum_{\mu=-\infty}^{\infty} |c_\mu^n|^2 \mu^2 . \quad (4.53)$$

Hogg und Huberman (1982) haben gefunden, daß dieser Erwartungswert nicht etwa linear mit der Zeit wächst (diffundiert), sondern daß er i.a. ein fastperiodisches Verhalten zeigt. Dieses Ergebnis wird im folgenden Abschnitt diskutiert.

4.4 Chaos in quantenmechanischen Systemen ?

4.4.1 Die Parameter in der Zeitentwicklung

Nach dem Ehrenfest'schen Theorem erfüllen die Erwartungswerte die klassischen Bewegungsgleichungen, hier also die Gl. (4.35). Wegen des nichtlinearen Terms ($\sin \theta_n \rightarrow \langle \sin \theta_n \rangle$) erhält man für die Erwartungswerte aber keine Abbildung der Form

$(\langle p \rangle_{n+1}, \langle \theta \rangle_{n+1}) = \vec{f}(\langle p \rangle_n, \langle \theta \rangle_n)$. Dennoch könnte man ja vermuten, daß der klassische Parameter k alleine auch für die quantenmechanische Beschreibung ausreicht. Die (in den Koeffizienten lineare !) Gl. (4.51) zeigt aber, daß zwei (dimensionslose) Parameter auftreten, nämlich $\tau = \hbar T / I$ und $V = V_0 T / \hbar$ mit

$V \cdot \tau = k$:

$$c_{\mu}^{n+1} = \sum_{\nu} c_{\nu}^n e^{-i\nu^2\tau/2} i^{|\mu-\nu|} J_{|\mu-\nu|}(V) \quad (4.54)$$

Dazu ist zu bemerken:

- 1) Die Gl. (4.54) ist offensichtlich 4π -periodisch in τ . Hogg und Huberman (1983) folgern daraus, daß die klassische Stabilitätsgrenze $k \sim 1$ quantenmechanisch keinen Sinn hat, denn man kann ja zwei um $m \cdot 4\pi$ verschiedene τ -Werte vorgeben, so daß $k_1 < 1$, $k_2 > 1$. Das quantenmechanische Verhalten wird davon aber nicht beeinflusst. Der Unterschied wird aber sehr deutlich bei der Annäherung an den klassischen Grenzfall bemerkbar (s. Kap. 4.6.2).
- 2) Ist τ ein rationales Vielfaches von 4π , also $\tau = p/q \cdot 4\pi$, p, q ganz, tritt die sogenannten Quantenresonanz ein, d.h. $\langle p^2 \rangle_n \propto n^2$ (Israelev et al. 1979, 1980). Für die Grundresonanz $p = q = 1$ (also $\tau = 4\pi$) kann man anschaulich dies so erklären, daß die Periode T dann ein ganzzahliges Vielfaches aller 'Eigenperioden' T_{ν} des (freien) Quantenrotators ist, wobei

$$T_{\nu} = h/E_{\nu} = \frac{h}{\frac{\hbar^2 \nu^2}{2I}} = \frac{4\pi I}{\nu^2 \hbar} = \frac{4\pi T}{\nu^2} = \frac{T}{\nu^2} \quad (4.55)$$

Allerdings erscheint die Quantenresonanz - von einem praktischen Standpunkt aus - eher künstlich, denn die kleinste Verstimmung führt wieder zu einem fastperiodischen Verhalten von $\langle p^2 \rangle_n$ (Hogg und Huberman 1983).

- 3) Die Existenz zweier unabhängiger Parameter führt noch zu einer weiteren Mehrdeutigkeit. Man kann eine Änderung klassischer Größen derart vornehmen, daß zwar V und τ variieren, aber nicht k . Insbesondere kommt hier eine Variation der Masse in Betracht. In Kap. 4.6.2 wird gezeigt, daß sich zwei Systeme mit unterschiedlicher Masse quantenmechanisch zwar quantitativ, aber nicht qualitativ unterscheiden. Insbesondere sollte auch hier bei der Annäherung an den klassischen Limes diese Mehrdeutigkeit verschwinden. Dieser Grenzfall wird durch Variation

von $\hbar$ angestrebt. Eine Variation dieser quantenmechanischen Größe läßt den klassischen Parameter k ja ebenfalls unverändert.

4.4.2 Die Rolle des Quasienergiespektrums

Für die meisten τ (also alle die, für die $\tau/4\pi$ irrational ist) zeigt das System ein fastperiodisches Verhalten, auch wenn der Wert des Parameters k klassisches Chaos impliziert: Der Erwartungswert $\langle p^2 \rangle_n$ wächst nicht linear mit n (also keine Diffusion), sondern bleibt beschränkt und oszilliert (s. Hogg und Huberman 1982 und Kap. 4.6.2). Hogg und Huberman (1982) konnten zeigen, daß dann fastperiodisches Verhalten auftritt, wenn das Quasienergiespektrum $\{\tilde{E}_\nu\}$ diskret ist. Dieses ist über die Eigenwerte des Zeitentwicklungsoperators U definiert:

$$U \psi_\nu(r, t) = e^{-i\omega_\nu t} \psi_\nu(r, t) \quad (4.56)$$

und

$$\tilde{E}_\nu = \hbar\omega_\nu \quad .$$

Für den Fall eines zeitunabhängigen Hamiltonoperators mit den Eigenwerten E_ν gilt: $\tilde{E}_\nu = E_\nu$. Im Kap. 4.5 wird ein lösbares Modell (Hannay und Berry 1980) vorgestellt, bei dem die Diskretheit des Quasienergiespektrums bewiesen werden kann. Sie ist verknüpft mit der Existenz einer Periode $\tilde{n}$ für den Zeitentwicklungsoperator, d.h. $U^{\tilde{n}}$ ist gleich dem Identitätsoperator (bis auf einen Phasenfaktor). Kosloff und Rice (1981) weisen darauf hin, daß es bei einem diskreten Quasienergiespektrum stets eine Zahl n_0 geben sollte, so daß U^{n_0} dem Identitätsoperator beliebig nahe kommt. Falls eine solche Zahl ($\tilde{n}$ oder n_0) existiert, verhält sich das System periodisch bzw. fastperiodisch. Im Falle des gekickten Quantenrotators läßt sich (im Augenblick) nur feststellen, daß sein fastperiodisches Verhalten auf ein diskretes Quasienergiespektrum schließen läßt. Diese Annahme wird durch eine Arbeit von Fishman et al. (1982) untermauert, die im folgenden kurz umrissen wird.

Die genannten Autoren konnten den Quantenrotator - ausgehend von der Eigenwertgleichung (4.56) - auf das eindimensionale Anderson-Lokalisierungsproblem abbilden. Letzteres behandelt die Bewegung eines Elektrons in einer eindimensionalen Kette mit den Gitterplätzen μ , wobei das Potential T_μ von Gitterplatz zu Gitterplatz 'random' variiert. Die Kinetik wird durch hopping-Matrixelemente W_μ beschrieben. Die Schrödingergleichung (ihre Herleitung ist auch ausführlich bei Schuster (1984) beschrieben) lautet

$$T_\mu u_\mu + \sum_{\nu \neq 0} W_\nu u_{\mu+\nu} = \epsilon u_\mu \quad . \quad (4.57)$$

Die behauptete Verbindung zum Quantenrotator ist durch folgende Relationen etabliert:

- 1) Die Impulsquantenzahl μ numeriert jetzt die Gitterplätze. Einem (um einen Gitterplatz μ_0) lokalisierten Elektron entspricht ein nicht-diffusives Verhalten des Impulses ($\langle p^2 \rangle_n$ oszilliert um $\hbar^2 \mu_0^2$).
- 2) Das kicking-Potential $V(\theta)$ des Rotatorproblems hängt mit den hopping-Matrixelementen zusammen:

$$W_\nu \propto \int_0^{2\pi} d\theta e^{i\nu\theta} \tan \frac{V(\theta)}{2} \quad . \quad (4.58)$$

- 3) Das Quasienergiespektrum $\{\tilde{E}\}$ sowie der Parameter τ gehen in das on-side Potential T_μ ein. Unabhängig von $\tilde{E}$ scheint für irrationales $\tau/4\pi$ die Variation von T_μ "hinreichend" 'random' zu sein, um das Elektron zu lokalisieren (Fishman et al. (1982) betonen, daß dies die entscheidende Annahme ist, die allerdings numerisch abgesichert wird). In diesem Fall sind die Eigenwerte ϵ_n diskret. Sie sind zugleich eindeutig umkehrbare Funktionen von $\tilde{E}$ (geht als Parameter in Gl. (4.57) ein):
 $\epsilon_n(\tilde{E}) = -W_0$. Daraus läßt sich ableiten, daß auch das Quasienergiespektrum des Quantenrotators diskret ist.

4.4.3 Spezielle Potentiale

Die gerade zitierte Verbindung (4.58) zwischen dem kicking-Potential und den hopping-Matrixelementen weist auf eine plausible Möglichkeit hin, doch ein mit der Zeit unbegrenztes Anwachsen von $\langle p^2 \rangle_n$ im quantenmechanischen System zu erzwingen (ohne daß Quantenresonanz vorliegt). Durch eine spezielle Wahl von $V(\theta)$ können die hopping-Matrixelemente derart langreichweitig gewählt werden, daß sie möglicherweise mit der (zur Lokalisierung tendierenden) 'randomness' des on-site Potentials T_μ konkurrieren und das Elektron dementsprechend delokalisieren können. Dann müßte auch $\langle p^2 \rangle_n$ des Rotatorproblems - wie gewünscht - anwachsen.

Diese Frage wurde von Schuster (1983) untersucht. Als Kandidaten für das Rotatorpotential kommen solche Funktionen in Frage, die Sprünge oder Knicke aufweisen. Die Fourierkoeffizienten V_μ dieser Potentiale (mit $V_\mu = \int d\theta e^{i\mu\theta} V(\theta)$) zeigen dann ein langsam abklingendes asymptotisches Verhalten, nämlich $|V_\mu| \sim 1/\mu$ bzw. $\sim 1/\mu^2$ für $\mu \rightarrow \infty$ (s. z.B. die bei Bronstein und Semendjajew (1973) aufgeführten Fouriertransformierten). Diese Eigenschaft überträgt sich (unbeschadet des Tangens in (4.58)) auch auf die hopping-Matrixelemente W_μ . Schuster (1983) betrachtet ein analytisch lösbares Modell des Quantenrotators, das von Grempel et al. (1982) eingeführt wurde und für das ebenfalls die oben beschriebene Äquivalenz zum Andersonproblem gilt. In diesem Modell wird die kinetische Energie $p^2/2I$ durch αp ersetzt. Man ist aber weiterhin an der Größe $\langle p^2 \rangle_n$ interessiert. Im übrigen argumentiert Schuster, daß die hier erzielten Resultate auch für den "gewöhnlichen" Rotator gelten. Er findet, daß

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\langle p^2 \rangle_{n+1} - \langle p^2 \rangle_0}{n^2} = Q \quad (4.59)$$

$$Q = \lim_{q \rightarrow \infty} \sum_{s=-\infty}^{\infty} |q_s V_{qs}|^2 .$$

Falls $Q \neq 0$, liegt also ein quadratisches Anwachsen der kinetischen Energie

($E_n = \frac{\hbar^2}{2I} \langle p^2 \rangle_n$) vor, obwohl das System nicht resonant ist (d.h. hier $\alpha/2\pi$ irrational). Dies wäre zwar kein normales diffusives, aber immerhin ein nichtperiodisches Verhalten.

Wir haben untersucht, ob sich diese Vorhersagen numerisch bestätigen lassen und dabei zwei Fälle unterschieden:

- 1) Wenn $|V_\mu| \sim 1/\mu$ für $\mu \rightarrow \infty$, divergiert die Summe in Q . Dies macht sich beim Quantenrotator dahingehend bemerkbar, daß schon nach einem Kick die kinetische Energie über alle Grenzen wächst, d.h. es werden beliebig hohe Quantenzustände μ angeregt. Möglicherweise kann man noch davon sprechen, daß das Elektron (des äquivalenten Lokalisierungsproblems) delokalisiert ist (es kann ja Gitterplätze mit beliebig hohem Index μ einnehmen), aber der Grenzfall erscheint problematisch.

Das Rotatorverhalten ist leicht zu erklären: Der Sprung im Potential führt nämlich zu einer unstetigen Wellenfunktion. Sei $\psi(0) = 1$, d.h. das System ist im Grundzustand präpariert. Bis zum Kick ändert es sich nicht, und unmittelbar danach (zur Zeit $T + \varepsilon$, $\varepsilon \rightarrow 0$) gilt gemäß Gl. (4.49):

$$\psi(T) = e^{-i/\hbar V(\theta)T} \psi(0) \quad . \quad (4.60)$$

Der Sprung in $V(\theta)$ überträgt sich (auf die Phase von) ψ . Die Ableitung divergiert an dieser Stelle (wenn man den Sprung durch eine immer steilere Gerade approximiert). Die kinetische Energie kann nicht mehr definiert werden, auch nicht über eine Reihe (4.53), da diese nicht mehr konvergiert (die dort auftretenden Entwicklungskoeffizienten sind ja die Fourierkoeffizienten der Wellenfunktion und zeigen - wegen der Unstetigkeit - ebenfalls das langreichweitige Verhalten $|c_\mu^1| \sim 1/\mu$).

- 2) Für $|V_\mu| \sim 1/\mu^2$ geht Q nach Null, wie folgende Abschätzung zeigt:

$$Q \sim \lim_{q \rightarrow \infty} \int_1^q ds \frac{1}{qs} = \lim_{q \rightarrow \infty} \frac{\log q}{q} = 0 \quad . \quad (4.61)$$

Es findet keine 'Diffusion' statt, weder im Impulsraum des Quantenrotators noch im Ortsraum des Lokalisierungsproblems. Dies wurde numerisch für den 'gewöhnlichen' Quantenrotator bestätigt. Wir haben dazu u.a. das stückweise lineare Potential

$$V(\theta) = V_0 v(\theta) = \begin{cases} -V_0 \cdot \theta & 0 < \theta < \pi \\ -V_0 \cdot (2\pi - \theta) & \pi < \theta < 2\pi \end{cases} \quad (4.62)$$

untersucht. Mit $V = V_0 T/\hbar$ benötigt man zur Auswertung von Gl. (4.51) die Matrixelemente

$$\tilde{V}_{\nu-\mu} = \langle \mu | e^{iV v(\theta)} | \nu \rangle = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\theta e^{i(\nu-\mu)\theta + iV v(\theta)}, \quad (4.63)$$

die für ganzzahlige V die einfache Form

$$\tilde{V}_\lambda = \begin{cases} 1/2 & \text{für } \lambda = \pm V \\ -i \frac{2V}{\pi} \frac{1}{(\lambda+V) \cdot (\lambda-V)} & \text{für } \lambda \neq \pm V \text{ ungerade} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (4.64)$$

Um jede Drift zu vermeiden, alterniert das Vorzeichen von V in jedem Zeitschritt. Für $V = -V_0 T/\hbar$ ergibt sich die entsprechende Fouriertransformierte $\tilde{V}_\lambda^{(-)}$ aus (4.64) gemäß

$$\begin{aligned} \operatorname{Re} \tilde{V}_\lambda^{(-)} &= \operatorname{Re} \tilde{V}_{-\lambda} \\ \operatorname{Im} \tilde{V}_\lambda^{(-)} &= -\operatorname{Im} \tilde{V}_{-\lambda} \end{aligned} \quad (4.65)$$

In Fign. 4.5 bis 4.7 sind die Ergebnisse für $V = 1$ und $V = 11$ dargestellt. Aufgetragen ist der Erwartungswert $\langle p^2 \rangle_n$ in Einheiten von $\hbar^2$ (oder der Erwartungswert der kinetischen Energie in Einheiten von $\hbar^2/2I$) als Funktion der Zeit (die in Einheiten von T , also durch die Zahl der Iterationen gegeben ist). Startkonfiguration

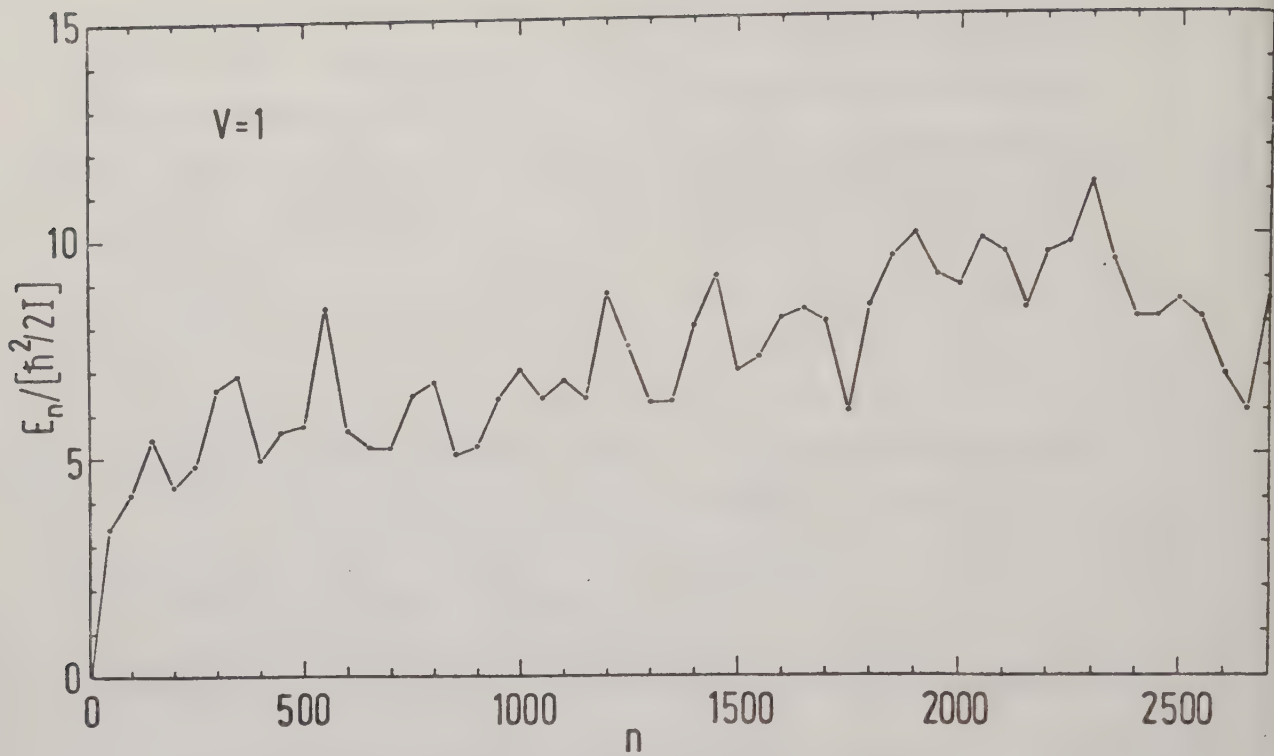


Fig. 4.5 Die Energie als Funktion der Zeit für den Parameterwert $V = 1$.

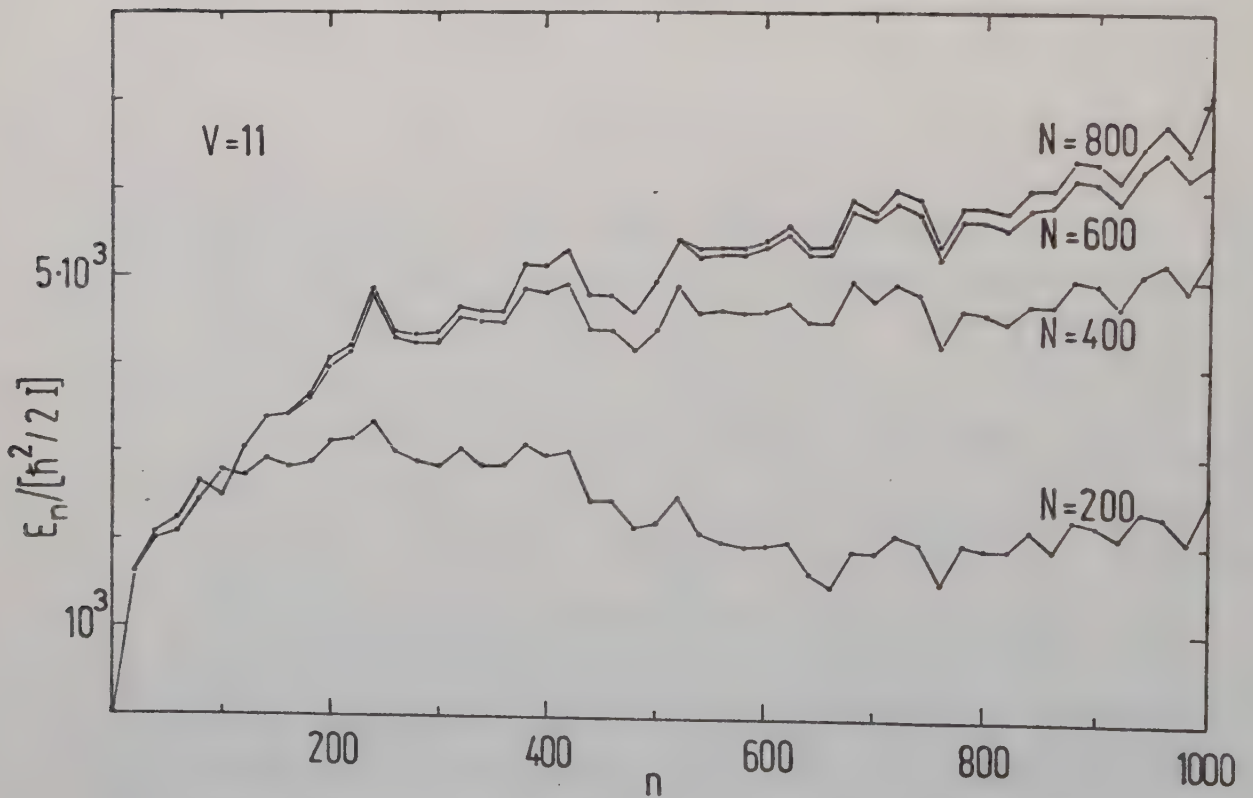


Fig. 4.6 Die Energie als Funktion der Zeit für $V = 11$. N gibt die Zahl der berücksichtigten Quantenzustände an.

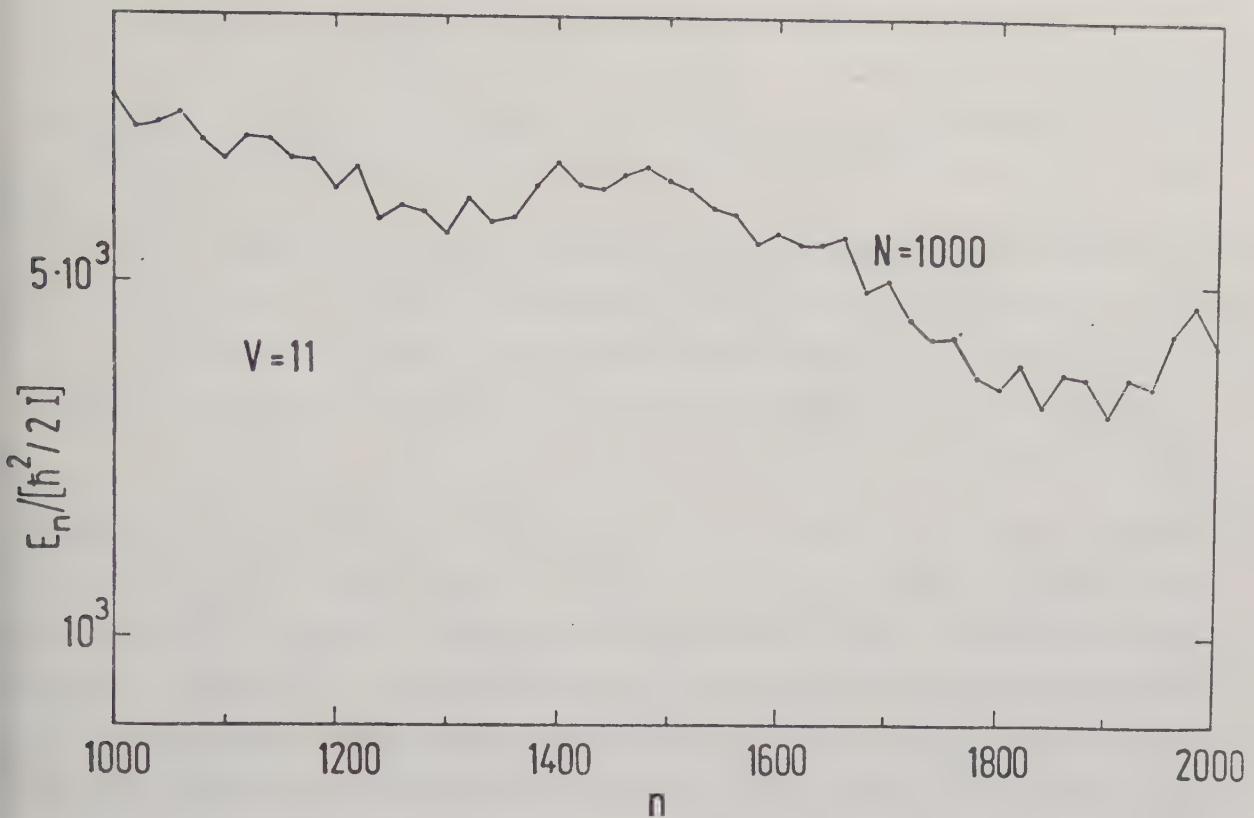


Fig. 4.7 Fortsetzung der Fig. 4.6 für die genaueste Kurven ($N = 1000$) .

ist in beiden Fällen der Grundzustand ($\langle p^2 \rangle_0 = 0$) . Es wird nur jede 50. bzw. 20. Iterierte dargestellt. Die geraden Verbindungslinien zwischen zwei Werten dienen nur der leichteren Orientierung.

Verschiedene Kurven zu gleichem Potentialparameter kommen aus unterschiedlichen Abbruchbedingungen für die in (4.51) auftretende Summe (es werden die Zustände mit den Quantenzahlen $-N \leq v \leq N$ berücksichtigt und N variiert). Für $V = 1$ (Fig. 4.5) reicht $N = 200$ aus (keine wesentliche Veränderung gegenüber $N = 100$). Bei $V = 11$ hemmen zu kleine Werte von N ($N = 200, 400, 600$) das System deutlich. Diese Kurven wurden deshalb nur bis $n = 1000$ verfolgt (Fig. 4.6). Die oberste Kurve kann aber praktisch als exakt angesehen werden (für $n < 1200$ kein Unterschied zwischen $N = 800$ und $N = 1000$), so daß das Abknicken (Fig. 4.7) nicht auf das Abschneiden der Summe zurückgeführt werden kann. Soweit man die zeitliche Entwicklung verfolgen kann, gilt: es fin-

det keine Diffusion des Impulses statt. Über $n = 2000$ hinauszugehen erfordert eine Mitnahme von sehr viel mehr als 2001 Zuständen ($N = 1000$) und damit eine entsprechend längere Rechenzeit. Nur so ließe sich aber gewährleisten, daß $\int d\theta |\psi_n(\theta)|^2 = \sum_{\mu} |c_{\mu}^n|^2$ von der exakten Normierung nicht mehr als 10^{-4} abweicht (also $\delta S = 1 - \sum_{\mu} |c_{\mu}^n|^2 \leq 10^{-4}$). Diese maximale Abweichung tritt natürlich erst nach sehr vielen Iterationen auf. Auch bei Annäherung an diesen Wert vergrößert sich δS in einem einzelnen Zeitschritt um nicht mehr als $\sim 10^{-7}$.

Abschließend kann man also festhalten, daß der quantenmechanische Rotator sich entweder resonant oder fastperiodisch zeigt. Er nimmt darin keine Ausnahmestellung ein: Soweit bekannt, ist noch kein Quantensystem mit 'intrinsischem' diffusivem Verhalten gefunden worden (in einer neuen Arbeit von Casati und Guarneri (1983) geht die Diffusion der kinetischen Energie auf äußere stochastische Kräfte zurück). Dennoch besteht ja die Möglichkeit, daß charakteristische Größen eines Quantensystems Unterschiede aufweisen, je nachdem, ob das klassische Pendant chaotisch ist oder nicht. Diese Fragestellung wird in den beiden letzten Kapiteln dieser Arbeit aufgegriffen.

4.5 Quantenmechanische Reflexion des klassischen Chaos I

4.5.1 Quantisierung auf dem Torus

In diesem Abschnitt soll eine von Hannay und Berry (1980) eingeführte (zeit-) diskrete Dynamik vorgestellt werden, um zwei Punkte an einem (weitgehend analytisch lösbaren) Modell zu beleuchten: Zum einen kann gezeigt werden, daß das Quasienergiespektrum diskret ist und eine Periode $\tilde{n}$ mit $U^{\tilde{n}} \sim 1$ existiert. Zum anderen kann gerade das Verhalten dieser Periode als Indikator für klassisches Chaos herangezogen werden.

Die Lösbarkeit des Problems wird durch eine gewisse Künstlichkeit erkaufte. Unsere Überlegungen, die entsprechenden Beschränkungen zu beseitigen, um den Anschluß an den gekickten Rotator herzustellen, werden in Kap. 4.5.2 diskutiert.

- 1) Die zentrale Restriktion in dem Modell wird bezüglich der auf dem Phasenraum definierten Zustandsfunktionen vorgenommen. Erlaubt sind nur solche, die nicht nur periodisch im Ort (Periode Δq), sondern auch periodisch im Impuls (Δp) sind. Die p, q -Ebene (der Phasenraum eines Systems mit zwei Freiheitsgraden) wird so in Elementarzellen (Rechtecke $\Delta q \times \Delta p$) eingeteilt. Zwei Punkte (p, q) und (p', q') mit $p' = p + \nu \Delta p$ und $q' = q + \mu \Delta q$ sind äquivalent (werden identifiziert). Die Ortskoordinate ließe sich noch als Winkel interpretieren, der Impuls dagegen verliert seine physikalisch anschauliche Bedeutung: beide Koordinaten sind völlig gleichberechtigt. Die Dynamik wird durch die lineare Abbildung (4.66) beschrieben:

$$\begin{aligned} p_{n+1} &= T_{11} p_n + T_{12} q_n \\ q_{n+1} &= T_{21} p_n + T_{22} q_n \end{aligned} \quad (4.66)$$

Der Index n zählt die Iterationen. (Wir betrachten wieder nur stroboskopische Aufnahmen des Systems an den äquidistanten Zeitpunkten $t = nT$, wobei T durch die zeitliche Periodizität des Potentials vorgegeben ist, vgl. Kap. 4.3.1.)

Die Abbildung soll der Bedingung genügen, daß sie die Gitterstruktur des Phasenraums unverändert läßt, d.h. die Bilder zweier äquivalenter Punkte sollen wieder äquivalent sein. Setzt man (p, q) und (p', q') in (4.66) ein, so ergeben sich daraus für die Matrixelemente der linearen Abbildung $\hat{T}$ die Forderungen:

$$T_{11} = \tilde{T}_{11}, \quad T_{22} = \tilde{T}_{22}, \quad T_{12} \frac{\Delta q}{\Delta p} = \tilde{T}_{12}, \quad T_{21} \frac{\Delta p}{\Delta q} = \tilde{T}_{21}, \quad (4.67)$$

wobei alle Größen mit Tilde ganzzahlig sein müssen. Dann kann die Abbildung auch auf eine Elementarzelle beschränkt werden. Da gegenüberliegende Seiten identifiziert werden, ist die Elementarzelle topologisch äquivalent zu einem Torus. Mit $\bar{q}$ und $\bar{p}$ als 'Ort' und 'Impuls' in Einheiten von Δq und Δp lautet die Abbildung dann

$$\begin{aligned}\bar{p}_{n+1} &= \left(\tilde{T}_{11} \bar{p}_n + \tilde{T}_{12} \bar{q}_n \right) \bmod 1 \\ \bar{q}_{n+1} &= \left(\tilde{T}_{21} \bar{p}_n + \tilde{T}_{22} \bar{q}_n \right) \bmod 1\end{aligned}\quad (4.68)$$

Es soll noch einmal betont werden, daß die oben eingeführte Gitterstruktur des Phasenraums und das Zurückfalten auf eine Zelle (letzteres ist für chaotische Bewegung ja unerläßlich, s. Kap. 4.1) völlig äquivalent sind. Wenn $\hat{T}$ einen Eigenwert besitzt, der betragsmäßig größer als eins ist, führt die Dynamik in der Tat zu klassischem chaotischen Verhalten.

- 2) Quantenmechanisch führt die Forderung, daß die Wellenfunktion periodisch in Ort und Impuls ist, zu einer Diskretisierung beider Größen. Aus der Periode im 'Orts'raum folgt (wie gewohnt) die Bedingung für die Wellenvektoren

$$k_\mu \Delta q = \mu 2\pi, \quad (4.69)$$

so daß die Wellenfunktion die Darstellung besitzt

$$\psi(q, t) = \sum_\mu c_\mu(t) e^{ik_\mu q}. \quad (4.70)$$

Wegen der Periodizität im 'Impuls'raum sind aber nur die Wellenvektoren k_v mit $1 \leq v \leq N$ voneinander verschieden, wobei k_N durch die Bedingung definiert ist

$$\hbar k_N = \hbar N \frac{2\pi}{\Delta q} = \Delta p. \quad (4.71)$$

Die Zustände k_v und $k_{v'} = k_v + \lambda k_N$ ($v' = v + \lambda N$) sind äquivalent. Für die Koeffizienten in (4.70), die ja nicht anders als die 'Impuls'darstellung der Wellenfunktion bedeuten, folgt daraus

$$c_{\mu+N} = c_{\mu} \quad . \quad (4.72)$$

Setzt man $k_{\mu} = k_{\nu} + \lambda k_N$ in (4.70) ein, erhält man

$$\psi(q,t) = \sum_{\nu=1}^N c_{\nu}(t) e^{ik_{\nu}q} \sum_{\lambda} e^{i(\lambda N \frac{2\pi}{\Delta q})q} \quad . \quad (4.73)$$

Die zweite Summe ist eine typische Gittersumme und nur dann von Null verschieden, wenn

$$N \frac{2\pi}{\Delta q} q = Q 2\pi \quad , \quad (4.74a)$$

woraus die erlaubten Orte q_Q folgen

$$q_Q = Q \frac{\Delta q}{N} \quad . \quad (4.74b)$$

Die Periodizität im 'Impuls'raum erzwingt also die Diskretisierung der 'Orts'variablen. Wegen der q -Periodizität kann auch die Quantenzahl Q auf $1 \leq Q \leq N$ beschränkt werden.

Aus (4.71) folgt weiterhin die wichtige Relation

$$\hbar = \frac{\Delta p \Delta q}{2\pi N} \quad . \quad (4.75)$$

Die Quantisierung der Dynamik (4.68) auf dem Torus hat also auch zur Konsequenz, daß das Plank'sche Wirkungsquantum mit den klassischen Perioden verknüpft wird. Da die Zahl N noch völlig offen ist, kann man durch Variation dieser Größe verschiedene Grenzfälle betrachten. Hannay und Berry untersuchten bei festem $\Delta p, \Delta q$ für $N \rightarrow \infty$ den klassischen Limes, also $\hbar \rightarrow 0$. $\hbar$ durchläuft dabei eine ganze Folge von Werten. Der Fall $\hbar = 1$ wird von den Autoren als 'extremer Quantenlimes' bezeichnet. In Kap. 4.5.2 wird die von uns betrachtete Möglichkeit diskutiert, bei festem $\hbar$ für $N \rightarrow \infty$ den quantenmechanischen Rotator als Grenzfall zu erhalten.

- 3) Gesucht wird der Operator $U(t,t')$, der die zeitliche Entwicklung der Wellenfunktion beschreibt. Da es in je-

der der beiden äquivalenten Darstellungen ('Orts'- oder 'Impuls'-) nur N verschiedene Quantenzahlen gibt, ist U darstellbar durch eine endliche $N \times N$ Matrix und kann demzufolge nur maximal N verschiedene Eigenwerte besitzen. Die Quantisierung auf dem Torus erzwingt also auch ein diskretes Quasienergiespektrum! Wählt man die 'Orts'-darstellung, so ist die Dynamik der Wellenfunktion durch die diskretisierte Form des sonst üblichen Integrals $\psi(r,t) = \int dr' U(r,r',t,t') \psi(r',t')$ (mit den Matrixelementen $\langle r|U(t,t')|r'\rangle = U(r,r',t,t')$) gegeben:

$$\psi_Q^{n+1} = \sum_{Q'} U_{QQ'} \psi_{Q'}^n, \quad (4.76)$$

wobei

$$\psi_Q^n = \psi(q = Q \frac{\Delta q}{N}, t = nT)$$

und $U_{QQ'}$ sind die Matrixelemente von U (für einen Zeitschritt, also $U_{QQ'} = \langle r=Q|U(t=(n+1)T, t'=nT)|r'=Q'\rangle$, vgl. (4.48)).

Hannay und Berry zeigen, daß in ihrem Modell der Zeitentwicklungsoperator allein durch die in (4.67) aufgeführten Matrixelemente der klassischen Abbildung $\hat{\tilde{T}}$ (sie bestimmt die Dynamik) sowie durch die Zahl N aus (4.71), (4.75) (Festlegung von $\hbar$) gegeben wird. Dies wird besonders deutlich in der Bestimmungsgleichung für die Periode $\tilde{n} = \tilde{n}(\hat{\tilde{T}}, N)$ mit $U^{\tilde{n}} = \underline{1} e^{i\phi}$. Eine solche Periode existiert für die zugelassenen Abbildungen $\hat{\tilde{T}}$ immer (die Berechnung von U zeigt, daß nur solche $\hat{\tilde{T}}$ erlaubt sind, bei denen in jeder Zeile und Spalte genau eine gerade und eine ungerade Zahl auftritt ('Schachbrettbedingung')). Es ist diejenige Potenz von $\hat{\tilde{T}}$, für die gilt:

$$(\hat{\tilde{T}})^n = \underline{1} + N \hat{t}, \quad (4.77)$$

wobei $\hat{t}$ wieder eine Matrix mit ganzzahligen Elementen ist. (Es sei an dieser Stelle bemerkt, daß die Bedingung für eine Periodizität des klassischen Systems eine andere ist, nämlich $(\hat{\tilde{T}})^{n_{kl}} = \underline{1}$. Zwar erfüllt n_{kl} auch

(4.77) mit $\hat{t} = 0$, aber die Umkehrung gilt nicht.) Die Berechnung von $\tilde{n}$ erfolgt in der Regel numerisch. Dabei kommt einem eine einfache Rekursionsformel zugute, die für Matrizen $\hat{T}$ mit ganzzahligen Elementen und $\det \hat{T} = 1$ gilt:

$$\begin{aligned} \hat{T}^k &= a_k \hat{T} - a_{k-1} \mathbb{1} \\ a_{k-1} &= (\text{Sp } \hat{T}) a_k - a_{k-1} \end{aligned} \quad (4.77a)$$

- 4) Für die uns interessierende Frage nach quantenmechanischen Indikatoren für klassisches Chaos ist die folgende Feststellung wichtig: Das quantenmechanische System ist immer periodisch, unbeschadet der Natur der klassischen Abbildung. Bei Annäherung an den klassischen Limes ($\hbar \rightarrow 0$ durch $N \rightarrow \infty$) zeigt die Periode $\tilde{n}(N)$ allerdings das gesuchte unterschiedliche Verhalten.

Für alle zugelassenen elliptischen Abbildungen (reguläres klassisches Verhalten, geschlossene Trajektorien) ist $\tilde{n}(N) = 4$ (falls N hinreichend groß), also eine völlig reguläre Funktion. Die N möglichen Eigenvektoren von U verteilen sich auf die vier erlaubten Eigenwerte, denn aus $U^{\tilde{n}} = \mathbb{1} e^{i\phi}$ folgt für die Eigenwerte (man denke sich U in der Diagonaldarstellung gegeben) $\exp(i\lambda\tilde{n}) = \exp(i\phi)$, also

$$\lambda_m = \frac{m 2\pi + \phi}{\tilde{n}}, \quad 1 \leq m \leq \tilde{n}, \quad (4.78)$$

Diese starke Entartung des Spektrums ist typisch für reguläre Systeme und wird auch 'level clustering' genannt (Hanney und Berry 1980, Casati et al. 1980, McDonald und Kaufman 1979).

Ist die Abbildung hyperbolisch (chaotisches klassisches Verhalten), so zeigt $\tilde{n}(N)$ einen sehr irregulären Verlauf als Funktion von N . Noch für sehr große N sind die Schwankungen in $\tilde{n}(N)$ bedeutsam, auch wenn die Ergebnisse von Hanney und Berry (1980) anzudeuten scheinen, daß $\tilde{n}(N)/N$ einer Konstanten zustrebt. Die Eigenwerte

sind i.a. nicht entartet. Man sagt, daß Spektrum zeigt 'level repulsion'. Dies ist charakteristisch für irreguläre Systeme (loc. cit.). Zur Illustration seien für die hyperbolische Abbildung $\hat{T} = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 3 & 2 \end{pmatrix}$ (ein positiver Liapunov-Exponent) einige Werte von $\tilde{n}(N)$ in Tab. 4.1 angegeben (für $N < 20$ in Übereinstimmung mit Hannay und Berry (1980)).

Tabelle 4.1 Periode $\tilde{n}(N)$ für eine hyperbolische Abbildung

N	3	5	7	9	11	13	15	17	19	21	23	25	27	29
$\tilde{n}$	6	3	8	18	10	12	6	18	5	24	11	15	54	15

N	99009	99019	99029	99039	99049	99059	99069
$\tilde{n}$	1080	16318	14168	11004	8028	26226	99066

4.5.2 Der Quantenrotator als Grenzfall ?

Uns interessierte die Frage, ob sich mit Hilfe des von Hannay und Berry (1980) entwickelten Formalismus auch Aussagen über das Quasienergiespektrum des gekickten Quantenrotators gewinnen lassen. Die in diesem Problem nicht vorhandene Periodizität Δp im Impulsraum sollte dabei durch den Grenzfall $\Delta p \rightarrow \infty$ darstellbar sein. Anschaulich gesprochen, wird der Torus, auf den die Dynamik (4.68) beschränkbar ist, zum Zylinder (Phasenraum des Pendels) deformiert.

Ausgangspunkt ist die Gl. (4.35), in die das quadratische Potential $V(q) = 1/2 V_0 q^2$ eingesetzt wird. Deswegen muß die zweite Zeile in (4.35) auch durch ein 'modulo' ergänzt werden (dies ist beim periodischen Potential $V(q) = -V_0 \cos q$ auch möglich, aber unnötig!). Mit $\kappa = V_0 T$ und $\gamma = T/I$ ($\kappa \gamma = k$ ist der relevante klassische Parameter) erhält man

$$\begin{aligned} p_{n+1} &= p_n - \kappa q_n \\ q_{n+1} &= (\gamma p_n + (1-\kappa\gamma)q_n) \bmod \Delta q \end{aligned} \quad (4.79)$$

Schließt man auch die erste Gleichung durch ein $\bmod \Delta p$, so erhält man die Hannay-Berry-Dynamik (4.68) mit

$$\hat{\tilde{T}} = \begin{pmatrix} 1 & -\tilde{\kappa} \\ \tilde{\gamma} & 1 - \kappa\gamma \end{pmatrix}, \quad (4.80)$$

wobei $\tilde{\kappa} = \kappa \Delta q / \Delta p$, $\tilde{\gamma} = \gamma \Delta p / \Delta q$ ($\tilde{\kappa}\tilde{\gamma} = \kappa\gamma$).

In Abhängigkeit von k zeigen beide Abbildungen (4.79), (4.80) sowohl chaotisches als auch reguläres Verhalten (vgl. Kap. 4.3). Hier lassen sich die Liapunov-Exponenten sogar direkt bestimmen: Die Jakobimatrix ist wegen der Linearität der Abbildung mit $\hat{\tilde{T}}$ identisch und die Eigenwerte lauten:

$$\tilde{\lambda}_{\pm} = 1 - \frac{k}{2} \pm \sqrt{(1 - k/2)^2 - 1}. \quad (4.81)$$

(Es sind gerade die Eigenwerte der linearen Stabilitätsanalyse für das gekickte Pendel mit $V = -V_0 \cos \theta$, vgl. (4.40).) Für $k > 4$ werden die Eigenwerte reell, und $|\tilde{\lambda}_{-}| > 1$: die Abbildung ist hyperbolisch und besitzt einen positiven Liapunov-Exponenten, zeigt somit chaotisches Verhalten. Für $0 < k < 4$ ist sie elliptisch, die klassische Bewegung ist also periodisch. Da $\tilde{\kappa}$ und $\tilde{\gamma}$ ganzzahlig sein müssen, sind auch nur ganzzahlige k -Werte möglich, d.h. $k = 1, 2, 3$. Die klassischen Perioden n_{kl} mit $(\hat{\tilde{T}})^{n_{kl}} = 1$ bestimmt man aus der Rekursionsformel (4.77a): $n_{kl}(k=1) = 6$, $n_{kl}(2) = 4$, $n_{kl}(3) = 3$. (Für $k = 4$ ist die Abbildung parabolisch, also wie für $k > 4$ nicht periodisch.) Allerdings muß man hinzufügen, daß mit keinem der möglichen Wertepaare $\tilde{\kappa}, \tilde{\gamma}$ (mit $\tilde{\kappa}\tilde{\gamma} = k < 4$) die an die Matrix $\hat{\tilde{T}}$ gestellte 'Schachbrettbedingung' erfüllt werden kann. Im Sinne von Hannay und Berry (1980) sind diese Abbildungen nicht zugelassen. Dies ist eine Konsequenz der starken Einschränkungen, die die Quantisierung auf dem Torus nach sich zieht.

Um den angestrebten Grenzfall des Quantenrotators zu realisieren, soll bei festem $\hbar$ die Impulsperiode $\Delta p \rightarrow \infty$ gehen. Wegen (4.75) muß dann gelten $\Delta p(N) = \hbar N / \Delta q$. Da wir $\hbar$ festhalten, könnte man keinen Vergleich zwischen den regulären und den chaotischen Bereichen klassischen Verhaltens anstellen (wir erwarten quantenmechanisch stets periodisches Verhalten und Unterschiede erst für $\hbar \rightarrow 0$), selbst wenn die entsprechenden Parameterwerte ($k = 1, 2, 3$) erlaubt wären. Die Zielsetzung konzentriert sich also auf den Versuch, die diskrete Natur des Quasienergiespektrums nachzuweisen.

Die sich jetzt mit N ändernde Impulsperiode hat zur Konsequenz, daß sich die Matrixelemente von $\hat{T}$ aus (4.80) ändern:

$$\begin{aligned}\hat{T}_{12} &= -\kappa(N) \Delta q / \Delta p(N) = -\tilde{\kappa}(N) \\ \hat{T}_{21} &= \gamma(N) \Delta p(N) / \Delta q = \tilde{\gamma}(N)\end{aligned}\quad (4.82)$$

In der Gleichung ist bereits angedeutet, daß auch die physikalischen Parameter eine Folge durchlaufen. Die für den Quantenrotator gültigen Werte sind über $\kappa = \lim_{N \rightarrow \infty} \kappa(N)$ bzw. $\gamma = \lim_{N \rightarrow \infty} \gamma(N)$ definiert. Dieses Vorgehen ist zwingend, wenn man Quantenresonanz vermeiden will. Dies bedeutet, daß

$$\frac{\tau}{4\pi} = \frac{1}{4\pi} \hbar \lim_{N \rightarrow \infty} \gamma(N) = \hbar \gamma / 4\pi \quad (4.83)$$

irrational sein muß (s. Kap. 4.4.1). Mit $\gamma(N)$ aus (4.82), $\Delta q = 2\pi$ und damit $\Delta p(N) = \hbar N$ folgt

$$\frac{\tau}{4\pi} = \frac{1}{2} \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\tilde{\gamma}(N)}{N} \quad (4.84)$$

Um zu gewährleisten, daß dieser Ausdruck irrational ist, kann man sich z.B. einen unendlichen Kettenbruch (mit bekanntem Grenzwert) vorgeben und $\tilde{\gamma}(N)/N$ mit Hilfe der (Zähler bzw. Nenner) der Folge von (endlichen) Teilbrüchen definieren. Die Folge der $\tilde{\gamma}(N)$ legt dann jeweils die $\gamma(N)$ fest. Würde man $\gamma(N)$ festhalten (also $\gamma(N) \equiv \gamma$) und zugleich fordern, daß $\tau/4\pi = \hbar \gamma/4\pi$ irrational ist, kollidiert

man mit der Forderung (4.67): Bereits

$$\tilde{\gamma}(1) = \gamma \hbar / 2\pi = 2 \cdot (\tau / 4\pi)$$

wäre nicht ganzzahlig. Der festgesetzte Parameter k wird angesteuert, wenn

$$\kappa = \lim_{N \rightarrow \infty} \kappa(N) = \frac{k}{\gamma} = \frac{k}{\lim_{N \rightarrow \infty} \gamma(N)} = \frac{k\hbar}{\Delta q} \frac{1}{\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\tilde{\gamma}(N)}{N}} \quad (4.85)$$

Dies ist gewährleistet, wenn

$$\kappa(N) = \frac{k\hbar}{\Delta q} \frac{N}{\tilde{\gamma}(N)} = \frac{k \Delta p(N)}{\Delta q \tilde{\gamma}(N)} \quad (4.86)$$

Dann ist das Produkt $\kappa(N) \cdot \gamma(N) = k$ von N unabhängig. Damit folgt für die Matrixelemente

$$\tilde{\kappa}(N) = k / \tilde{\gamma}(N) \quad (4.87)$$

An dieser Stelle scheitert man endgültig an der Forderung (4.67), daß die Matrixelemente ganzzahlig sein müssen. Der angestrebte Grenzwert erscheint somit nicht durchführbar.

4.6 Quantenmechanische Reflexion des klassischen Chaos II

4.6.1 Definition einer quantenmechanischen Informationsentropie

Im Abschn. 4.2 ist die Kolmogorov-Entropie für klassische Systeme wahrscheinlichkeits-theoretisch, also ohne den Rückgriff auf das Konzept der Trajektorie, definiert worden. Chaotische Systeme sind durch eine endliche, periodische durch eine verschwindende K-Entropie gekennzeichnet. In die-

sem Kapitel wird eine Übertragung der klassischen Begriffe auf Quantensysteme diskutiert.

In der (gebräuchlichen) quantenmechanischen Beschreibung eines Systems ist das Auftreten von Wahrscheinlichkeiten zwingend. Ist $|\psi(t)\rangle$ die Wellenfunktion des Systems, so ist $|c_\mu(t)|^2 = |\langle a_\mu | \psi(t) \rangle|^2$ die Wahrscheinlichkeit dafür, zur Zeit t bei einer Messung der Observablen A deren Eigenwerte a_μ zu finden. $|a_\mu\rangle$ ist die dazugehörige Eigenfunktion. Es erscheint sinnvoll, als quantenmechanisches Analogon zur Rasterung des Phasenraums die Zerlegung des Hilbertraums in die den Eigenwerten a_μ zugeordneten Unterräume (anders formuliert: die Zerlegung des Identitätsoperators in die entsprechenden Projektoren, also $\underline{1} = \sum_\mu |a_\mu\rangle \langle a_\mu|$) heranzuziehen (Kosloff und Rice 1981). So wie die klassische Rasterung nicht eindeutig festgelegt ist, hat man hier die Freiheit in der Wahl der Observablen A . Diese Willkür wird beseitigt, indem man diejenige Observable (ggf. den vollständigen Satz kommutierender Observablen) auswählt, der die (noch zu definierende) Informationsentropie maximiert.

Zwischen der klassischen und der quantenmechanischen Beschreibung bestehen allerdings gravierende Unterschiede. Die für ein klassisches System definierte Informationsentropie $\tilde{h}_n(f, P_0)$ (s. Gl. (4.22)) ist einem Verbundraster P_n zugeordnet. Sie stellt diejenige Information dar, die man benötigt, um den Ausgang von n Experimenten (mit Sicherheit!) vorherzusagen. Dabei sind die möglichen Meßergebnisse durch die Zellen $\Omega_i^{(0)}$ der Ausgangsrasterung P_0 repräsentiert. Das Verbundraster P_n ist ein Hilfsmittel, um Verbundwahrscheinlichkeiten (Wahrscheinlichkeit für das Eintreten einer bestimmten Sequenz von Meßergebnissen) zu berechnen. Um diese Vorhersage von n Iterationen zu ermöglichen, muß das System anfänglich in einem sehr viel feineren Startraster lokalisiert werden, als dies durch P_0 geschieht. Die Verbundwahrscheinlichkeiten lassen sich (äquivalent) auch über dieses neue Startraster definieren: Es sind diejenigen Wahrscheinlichkeiten, mit der man das System in einer bestimmten Zelle des feineren Rasters findet. Wenn man das System dann lokalisiert hat, tritt die entsprechende Serie von n Meßergebnissen auch ein.

Quantenmechanisch stellt sich die Situation wie folgt dar: Selbst wenn man den Zustand eines Systems kennt, kann man nur die Wahrscheinlichkeit für das Auftreten eines Meßergebnisses angeben. Darüber hinaus ist die Definition einer (Verbund-) Wahrscheinlichkeit für das Eintreten einer bestimmten Sequenz von Meßergebnissen (Eigenwerten) nur dann sinnvoll, wenn jeweils eine destruktive Messung (Reduktion der Wellenfunktion) durchgeführt wird. Ein solcher Eingriff in die Dynamik soll hier aber unterbleiben. Dieser Punkt wird weiter unten noch einmal diskutiert. Selbst wenn man eine solche Verbundwahrscheinlichkeit definieren könnte, könnte man diese nicht einer feineren Unterteilung des Hilbertraums zuordnen. In dieser Hinsicht ist man an das einmal gewählte Raster (das Spektrum einer bestimmten Observablen A) gebunden.

Es erscheint uns daher sinnvoll, auf das Verbundraster ganz zu verzichten und statt dessen eine Informationsentropie h_n einzuführen, die nur Aussagen für eine Messung (nach n Zeitschritten; der Operator U ersetzt die klassische Abbildung f) macht:

$$h_n(A, U) = - \sum_{\mu} |c_{\mu}^n|^2 \log |c_{\mu}^n|^2 \quad . \quad (4.88)$$

Die darin auftretenden Wahrscheinlichkeiten sind gegeben durch

$$|c_{\mu}^n|^2 = \sum_{\lambda} p_{\lambda} |\langle a_{\mu} | U^n | a_{\lambda} \rangle|^2 \quad (4.89a)$$

bzw.

$$|c_{\mu}^n|^2 = |\langle a_{\mu} | U^n | \psi_0 \rangle|^2 \quad ; \quad (4.89b)$$

je nachdem, ob das System anfangs ($n = 0$) in einem Gemisch (beschrieben durch den Dichteoperator $\rho = \sum_{\lambda} p_{\lambda} |a_{\lambda}\rangle \langle a_{\lambda}|$) oder in einem reinen Zustand $|\psi_0\rangle = \sum_{\mu} \langle a_{\mu} | \psi_0 \rangle |a_{\mu}\rangle$ vorlag. Die so definierte Entropie ist diejenige Information, die man gewinnt, wenn man den Ausgang eines Experiments (Messung der Observablen A) nach n Iterationen erfährt. Für $n = 0$ stellt sie die quantenmechanische Erweiterung der in Gl. (4.14) definierten Informationsentropie $h(P_0)$ dar (noch keine Bezugnahme auf die Dynamik). Falls die zeitliche Entwicklung

des Quantensystems derart beschaffen ist, daß immer mehr Zustände (mit vergleichbarem Gewicht!) angeregt werden, so wächst die Entropie h_n an. Der Grenzwert

$$h(A,U) = \lim_{n \rightarrow \infty} h_n(A,U)/n \quad (4.90)$$

bleibt dann u.U. endlich.

Anschaulich könnte man dieses Ausschmieren der Wahrscheinlichkeitsverteilung über das gesamte Spektrum mit der Zerfaserung einer Zelle im Phasenraum vergleichen und einen endlichen Grenzwert als chaotisches Verhalten des Quantensystems interpretieren. Es sei aber darauf hingewiesen, daß im klassischen Fall der Grenzwert (4.90) mit einer entsprechend definierten Entropie verschwinden kann, obwohl das System chaotisch ist. Dies kann man am Beispiel der Bernoulliverschiebung (Kap. 4.2) belegen. Um nur den Ausgang einer einzigen Iteration (nach n Schritten) vorhersagen zu können, benötigt man stets dieselbe Information $h_n = \log 2$, nämlich die Kenntnis über die n -te binäre Stelle. h_n/n verschwindet dann für große n .

Schließlich kann man natürlich auch noch das Supremum von $h(A,U)$ bezüglich der möglichen Observablen A definieren:

$$\hat{h}(U) = \sup_{\{A\}} h(A,U) \quad (4.91)$$

Wegen der aufgeführten Unterschiede zum klassischen Konzept soll aber darauf verzichtet werden, diese maximale mittlere Informationsentropie $\hat{h}(U)$ als quantenmechanische Verallgemeinerung der klassischen Kolmogorov-Entropie zu bezeichnen. Die Entropie h_n erscheint aber auf jeden Fall geeignet, das jeweilige Verhalten des klassischen Grenzfalles zu signalisieren. Für den Fall des Quantenrotators zeigt sie anfänglich einen deutlichen Anstieg, wenn die Parameter der zeitlichen Entwicklung klassisches Chaos implizieren (Kap. 4.6.2). Sie kopiert damit zu Beginn der Iterationen das klassische Verhalten.

$h(A,U)$ (und damit auch $\hat{h}$) genügt der Forderung, daß sie verschwindet, wenn das System periodisch ist, also $U^n \sim 1$. Denn dann durchlaufen die Entropien h_n immer wieder die Folge $h_1, h_2, \dots, h_{\tilde{n}}$, deren Elemente beschränkt sind. Man kann nämlich davon ausgehen (und numerisch wird dies bestätigt), daß bei periodischem Verhalten nur eine endliche Zahl $N_{\max}$ von Zuständen durch das (periodisch einwirkende) Potential angeregt wird, so daß $h_{\tilde{n}} \leq \log N_{\max}$ (dies ist der Wert für eine gleichwahrscheinliche Besetzung dieser Zustände). Somit ist $\lim_{n \rightarrow \infty} h_n/n = 0$. Es ist gerade diese Eigenschaft, die mit den von Kosloff und Rice (1981) eingeführten Verbundwahrscheinlichkeiten $W_{i_1 \dots i_n}$ nicht erfüllt werden kann. Die Autoren versuchen, das beschriebene klassische Konzept (sukzessives Verfolgen eines Phasenpunktes) zu übertragen und untersuchen die Wahrscheinlichkeit dafür, in einer aufeinanderfolgenden Serie von n Messungen die Meßergebnisse $a_{i_1}, a_{i_2}, \dots, a_{i_n}$ zu erhalten. Jede Messung soll nicht-destruktiv sein, d.h. sie wird stets nur an einem (hinreichend großen) Teil des Ensembles durchgeführt, der danach entfernt wird. Der (jeweilige) Rest entwickelt sich ungestört weiter. Die Messungen sind daher völlig unabhängig voneinander und die Verbundwahrscheinlichkeit faktorisiert (eine Eigenschaft, die die klassischen Größen nicht aufweisen!):

$$W_{i_1 \dots i_n} = \prod_{k=1}^n |c_{i_k}^k|^2, \quad (4.92)$$

wobei $|c_{i_k}^k|^2$ durch (4.89) festgelegt ist. So definierte Verbundwahrscheinlichkeiten führen aber dazu, daß die von den Autoren als K-Entropie bezeichnete Größe auch bei einem periodischen System endlich bleibt.

Ihre Informationsentropie ist gegeben durch

$$h_n^{KR}(A,U) = - \sum_{i_1 \dots i_n} W_{i_1 \dots i_n} \log W_{i_1 \dots i_n}. \quad (4.93)$$

Die Summation erstreckt sich über alle möglichen Sequenzen von n Meßergebnissen. Mit (4.92) folgt:

$$h_n^{KR}(A, U) = - \sum_{i_1 \dots i_n} \left(\prod_{k=1}^n |c_{i_k}^k|^2 \right) \sum_{k=1}^n \log |c_{i_k}^k|^2 \quad (4.94)$$

Die zweite Summation erfaßt die n Elemente einer möglichen Meßreihe. h_n^{KR} zerfällt daher in n Summanden, von denen ein herausgegriffener ($k = m$) lautet

$$\left\{ \sum_{i_m} |c_{i_m}^m|^2 \log |c_{i_m}^m|^2 \right\} \cdot \left\{ \sum_{\substack{i_1 \dots i_n \\ n \neq m}} \prod_{\substack{k=1 \\ k \neq m}}^n |c_{i_k}^k|^2 \right\} = h_m(A, U) \quad (4.95)$$

$h_m(A, U)$ ist die von uns in (4.88) eingeführte Entropie. Die Identität besteht, da der zweite Faktor in (4.95) eins ergibt. Läßt man nämlich jeweils nur einen Index, beginnend mit i_1 , laufen, kann man nacheinander die Normierungsbedingungen ausnutzen:

$$\sum_{\substack{i_2 \dots i_n \\ n \neq m}} \left(\prod_{\substack{k=2 \\ k \neq m}}^n |c_{i_k}^k|^2 \right) \cdot \left(\sum_{i_1} |c_{i_1}^1|^2 \right) = \sum_{\substack{i_2 \dots i_n \\ n \neq m}} \prod_{\substack{k=2 \\ k \neq m}}^n |c_{i_k}^k|^2 \quad (4.96)$$

(der erste Faktor kann ja aus jedem Term der i_1 -Summe ausgeklammert werden).

Damit gilt

$$h_n^{KR}(A, U) = \sum_{m=1}^n h_m(A, U) \quad (4.97)$$

Sei $\tilde{n}$ wieder die Periode des Zeitentwicklungsoperators und speziell $n = \tilde{n} \cdot \lambda$, so folgt

$$h_n^{KR}(A, U) = \lambda \cdot \sum_{m=1}^{\tilde{n}} h_m(A, U) = \lambda h_{\tilde{n}}^{KR}(A, U) \quad (4.98)$$

Damit ergibt sich eine endliche zeitlich gemittelte Entropie:

$$\begin{aligned}
 h^{KR}(A, U) &= \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} h_n^{KR}(A, U) = \lim_{\lambda \rightarrow \infty} \frac{1}{\tilde{n} \lambda} \lambda h_{\tilde{n}}^{KR}(A, U) \\
 &= \frac{1}{\tilde{n}} h_{\tilde{n}}^{KR}(A, U) \quad . \quad (4.99)
 \end{aligned}$$

(Wenn der Grenzwert definiert ist, darf man auch die Teilfolge $n = \lambda \tilde{n}$ betrachten.) Demzufolge bleibt die von den Autoren als quantenmechanische Kolmogorov-Entropie bezeichnete Größe $h_k(U) = \sup_{\{A\}} h_k^{KR}(A, U)$ endlich.

Abschließend sei bemerkt, daß nur die beschriebene nicht-destruktive Messung geeignet erscheint, um eine Informationsentropie zu definieren. Berücksichtigt man dagegen die Reduktion der Wellenfunktion, so kann man zwar sinnvolle neue Verbundwahrscheinlichkeiten definieren: Sei $\tilde{W}_{i_0, i_1, \dots, i_n}$ die Wahrscheinlichkeit dafür, in n aufeinanderfolgenden Messungen die Meßwerte $a_{i_0}, a_{i_1}, \dots, a_{i_n}$ zu erhalten. Dabei sei a_{i_0} im Ausgangsensemble mit der Wahrscheinlichkeit p_{i_0} vertreten (bei einer destruktiven Meßreihe ist es nicht nötig, eine kohärente Überlagerung als Startkonfiguration in Betracht zu ziehen). Es gilt

$$\tilde{W}_{i_0 \dots i_n} = p_{i_0} \prod_{k=1}^n p_{i_k, i_{k-1}} \quad (4.100)$$

mit

$$p_{i_k, i_{k-1}} = |\langle a_{i_k} | U | a_{i_{k-1}} \rangle|^2 \quad .$$

Aber es treten hier keine Potenzen des Zeitentwicklungsoperators U mehr auf, so daß sich eine Periodizität des Systems gar nicht mehr bemerkbar machen kann, eine Folge des starken Eingriffs, den eine destruktive Messung darstellt.

4.6.2 Numerische Ergebnisse zum Quantenrotator

In diesem Abschnitt soll die von uns definierte Informationsentropie für den gekickten Quantenrotator diskutiert werden. Die benötigten Wahrscheinlichkeiten $|c_\mu^n|^2$ sind dieselben, die in die Berechnung des Erwartungswerts $\langle p^2 \rangle_n$ (Gl. (4.53)) eingehen: Die quantenmechanische Rasterung P_0 ist sinnvoll durch das (diskrete) Impulsspektrum gegeben. Da in allen Rechnungen als Startkonfiguration ein symmetrischer Zustand ($\psi(\theta) = \psi(-\theta)$) gewählt wurde, gilt stets

$$c_\mu^n = c_{-\mu}^n \quad . \quad (4.101)$$

Damit ergibt sich für die Informationsentropie

$$h_n(U, p) = -|c_0^n|^2 \log |c_0^n|^2 - 2 \sum_{\mu=1}^{\infty} |c_\mu^n|^2 \log |c_\mu^n|^2 \quad ; \quad (4.102)$$

U ist in (4.49), c_μ^n in (4.54) gegeben. Natürlich kann man als Raster auch das Energiespektrum wählen: Da $E_\mu = \frac{\hbar^2}{2I} \mu^2$, ist wegen (4.101)

$$|c_{E_\mu}^n|^2 = |c_\mu^n|^2 (2 - \delta_{\mu,0}) \quad .$$

Damit ergibt sich für die auf das Energiespektrum bezogene Entropie

$$h_n(U, E) = -|c_0^n|^2 \log |c_0^n|^2 - \sum_{\mu=1}^{\infty} (2 |c_\mu^n|^2) \log (2 |c_\mu^n|^2) \quad . \quad (4.103)$$

Der gegenüber (4.102) zusätzlich auftretende Term

$$2 \sum_{\mu=1}^{\infty} |c_\mu^n|^2 \log 2$$

spielt für die Berechnung des Grenzwertes $\hat{h}(U)$ (Gl. (4.91)) keine Rolle, da $2 \sum_{\mu=1}^{\infty} |c_\mu^n|^2 = 1 - |c_0^n|^2$ stets endlich und so-

mit $\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} (1 - |c_0|^2) = 0$. Qualitativ sind $h_n(U, E)$ und $h_n(U, p)$ ebenfalls gleichwertig.

Zunächst sollen einige technische Details aufgeführt werden: Da die Besselfunktionen $J_\lambda(V)$ für $\lambda \gtrsim 2V$ sehr rasch abklingen (Abramowitz und Stegun 1972), benötigt man in der Reihe (4.54) nur eine begrenzte Zahl von Matrixelementen. Wir haben $\lambda_{\max}$ so gewählt, daß $|J_{(\lambda_{\max}-1)}(V)| > 10^{-6}$. Außerdem werden Koeffizienten c_μ^n mit $|c_\mu^n|^2 \lesssim 10^{-8}$ Null gesetzt. Wir haben auch genauere Abbruchbedingungen getestet und festgestellt, daß sie auf das Ergebnis praktisch keinen Einfluß haben. Dies kann man auch als Indiz dafür nehmen, daß das System nicht chaotisch ist. Die Abbruchbedingungen bestimmen natürlich, wie gut die Wellenfunktion normiert bleibt. Wir haben Abweichungen $\delta S = 1 - \sum |c_\mu^n|^2$ bis ca. 10^{-6} toleriert (Veränderungen von δS bei einem Einzelschritt $\sim 10^{-7}$; vgl. auch Kap. 4.4.3).

Ein Ziel unserer Untersuchungen war es, Unterschiede im Zeitverhalten der Energie $E_n = \hbar^2 \langle p^2 \rangle_n / (2I)$ und der Entropie h_n zu finden, je nachdem, ob der Parameter $k = V\tau = \frac{V_0 T}{\hbar} \cdot \frac{\hbar T}{I}$ (klassisches) reguläres oder chaotisches Verhalten impliziert. Dazu wurden die quantenmechanischen Parameter V und τ zunächst in zweierlei Hinsicht variiert: Bei festem k haben wir $\hbar$ verkleinert (ausgehend von der willkürlichen Festsetzung $\hbar = 1$), um so die Annäherung an den klassischen Limes ein Stück weit zu simulieren. Verschiedene k -Werte sind eingestellt worden, indem die Kickperiode T geändert wurde (vgl. Abschn. 4.3.1). Die benutzten Werte sind in Tab. 4.2 zusammengestellt.

Die Ergebnisse für die Entropie $h_n(U, p)$ sind in den Fign. 4.8 bis 4.11 graphisch dargestellt. Der zeitliche Verlauf der Energie E_n ist für zwei Parameter in Fig. 4.12 zu sehen (in Einheiten von $\hbar^2/2I$). Aufgeführt sind nur die ersten 50 Iterationen. Dies reicht aus, um die Unterschiede aufzuzeigen. Die Rechnungen wurden über $n > 50$ fortgesetzt, bis sich das Verhalten des Systems nicht mehr wesentlich änderte. Startkonfiguration ist stets der Grundzustand ($h_0 = 0, E_0 = 0$) .

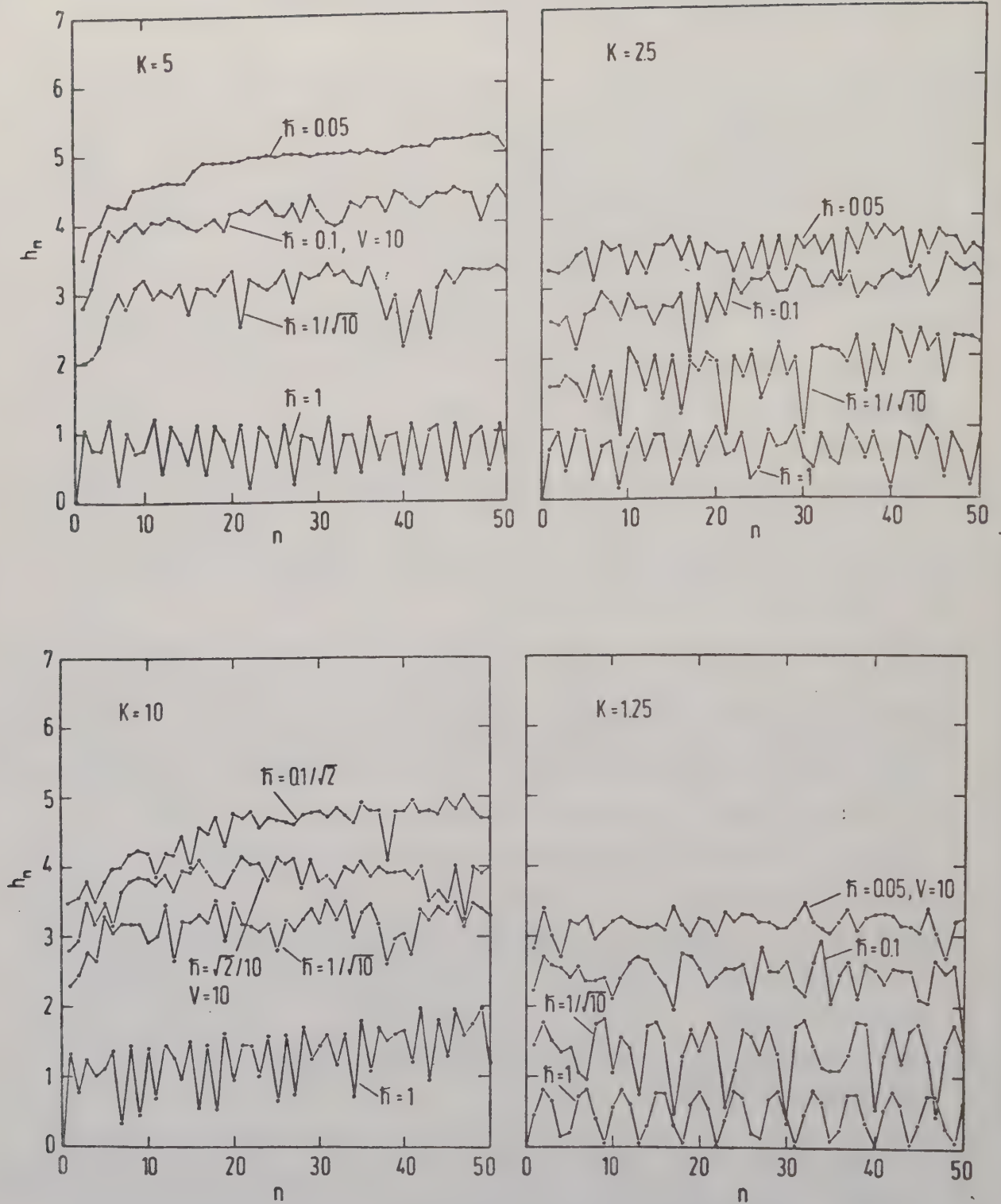


Fig. 4.8 - 4.11 Die quantenmechanische Informationsentropie des gekickten Rotators für verschiedene Werte von k und $\hbar$ ($k > 4$: klassisch chaotisches Verhalten). In drei Fällen gibt es eine Kurve mit $V = 10$ (für $k = 2.5$ s. Fig. 4.13).

Tabelle 4.2 Ausgangsparameter für die Variation von $\hbar$

k	V_0 T	T/I	T	Bemerkungen	Fig.
10	$\sqrt{2}$	$5 \sqrt{2}$	2	} klassisch chaotisch	4.10
5	1	5	1		4.8
2.5	$1/\sqrt{2}$	$5/\sqrt{2}$	$1/\sqrt{2}$	} klassisch regulär	4.9
1.25	1/2	2.5	1/2		4.11

Die Resultate lassen sich wie folgt zusammenfassen:

1. Grundsätzlich wird das von Hogg und Huberman (1982) gefundene fastperiodische Verhalten für alle untersuchten Werte von k bei allen Werten von $\hbar$ bestätigt: Die Energie bleibt beschränkt, ebenso die Informationsentropie $h_n(U,p)$, so daß die maximale mittlere Informationsentropie $\hat{h}(U)$ verschwindet.
2. Für $\hbar = 1$ findet man für alle Werte von k praktisch den gleichen, fastperiodischen Verlauf beider Größen.
3. Für $\hbar < 1$ (Annäherung an den klassischen Limes) zeigt die Entropie für $k = 5$ und $k = 10$ zunächst ein ansteigendes Verhalten, das umso ausgeprägter ist, je kleiner $\hbar$ wird. Würde sich dieses Verhalten fortsetzen, käme man zu einer endlichen Entropie $\hat{h}(U)$. Man kann also sagen, daß das Quantensystem am Anfang das klassische Verhalten simuliert. Diese Interpretation ist im Augenblick weitgehend akzeptiert (Fishman et al. 1982, Israelev et al. 1980, Zaslowsky 1981). Für $k < 5$ kann man dagegen von einem durchgehend oszillierenden Verlauf reden.
4. Das anfänglich unterschiedliche Verhalten kommt ebenso im Verlauf der Energie zum Ausdruck. Um zu zeigen, daß der in Fig. 4.12 abzulesende Anstieg der Energie bei

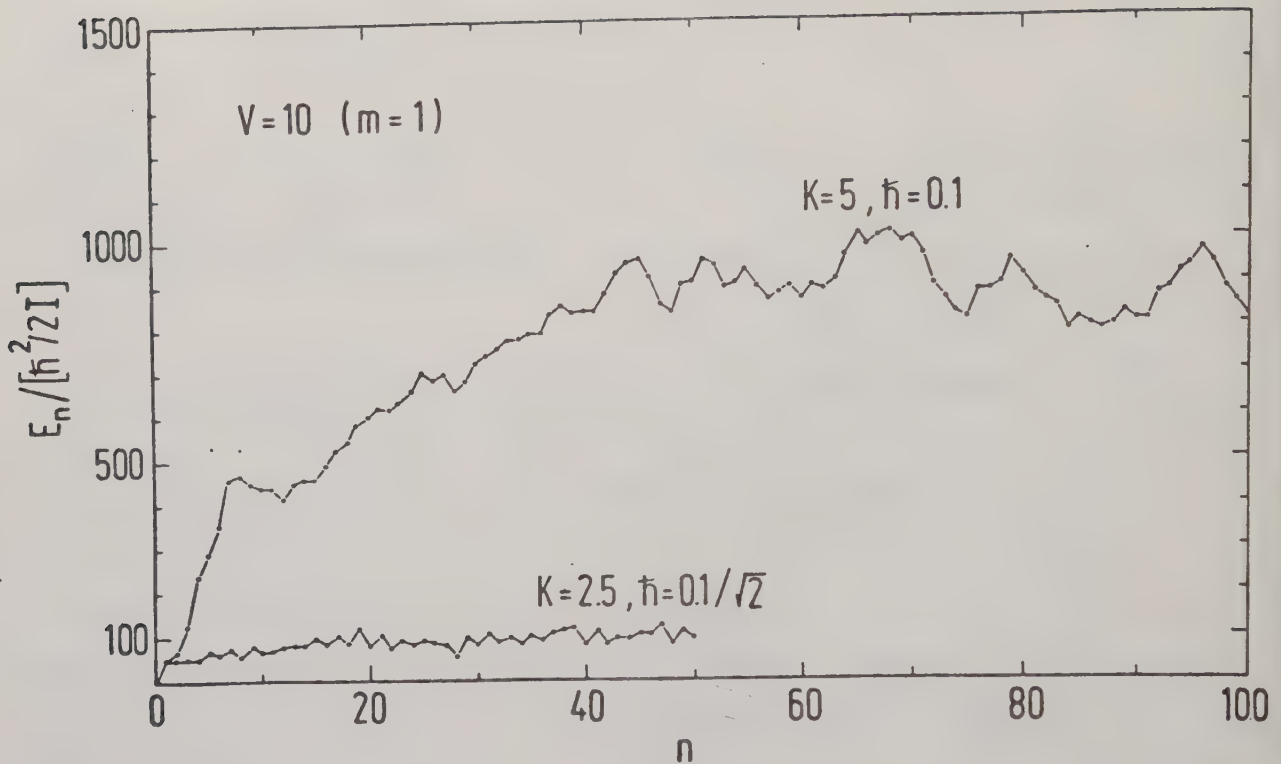


Fig. 4.12 Die Energie des gekickten Quantenrotators als Funktion der Zeit. $k = 5$: klassisches Chaos. Einer der relevanten quantenmechanischen Parameter ist für beide Werte von k gleich ($V = 10$) .

$k = 5$ sich nicht unbegrenzt fortsetzt, sondern schließlich in ein quasiperiodisches Verhalten einmündet, sind hier 100 Iterationen aufgezeichnet. Daß die Energie im Gegensatz zur Entropie sehr viel länger anwächst, ist so zu verstehen: Die Zahl der angeregten Zustände mit einer ins Gewicht fallenden Wahrscheinlichkeit bleibt nach einiger Zeit konstant. Die Entropie erreicht dann ihren Sättigungswert. In dieser Menge relevanter Zustände werden dann nur die niedrigen Quantenzahlen durch höhere ersetzt, so daß die Energie noch eine Zeitlang wächst. Die Entropie würde weiter zunehmen, wenn immer mehr Zustände mit einem vergleichbaren Gewicht angeregt würden. Ein solches gleichmäßiges Ausschmieren der Wahrschein-

lichkeitsverteilung $p_n(\mu) = |c_\mu^n|^2$ über alle Quantenzahlen μ käme der klassischen Zerfaserung einer Phasenzelle am nächsten. Die Entropie erscheint somit besser geeignet, daß nicht-chaotische Verhalten von Quantensystemen aufzuzeigen. Der Vergleich von Energie und Entropie zeigt auch, daß nicht jedes lineare Zeitgesetz bei der Energie als Diffusion gedeutet werden darf (vgl. auch Israelev et al. 1980).

5. Bei gleichem $\hbar$ ist in Systemen mit größerem k natürlich auch der Parameter V größer. Dieser bestimmt ja, wieviele Matrixelemente in Reihe (4.54) mitgenommen werden. Um zu zeigen, daß der beobachtete Anstieg von Energie und Entropie nicht auf diese Tatsache zurückzuführen ist, ist für jeden Wert von k ein Wert von $\hbar$ so gewählt worden, daß $V = 10$. Zum exemplarischen Vergleich sind für $k = 5$ und $k = 2.5$ diese Kurven gesondert in Fig. 4.13 gezeigt.
6. Um den Einfluß der Startkonfiguration zu testen, haben wir für einige Parameterwerte als Ausgangszustand zwei verschiedene Gauß'sche Wellenpakete gewählt, d.h. eine endliche Zahl von Koeffizienten $-v_{\max} \leq v \leq v_{\max}$ mit $c_v^0 = \gamma (a/\sqrt{\pi})^{1/2} \exp(-a^2 v^2/2)$ vorgegeben; a bestimmt die Lokalisierung im Ortsraum, γ ergibt sich aus der Normierungsbedingung. In Tab. 4.3 sind die relevanten Anfangsdaten gegeben.

Tabelle 4.3 Parameter für die Gauß'schen Wellenpakete

a	$v_{\max}$	$\langle E \rangle_0 / (\hbar^2/2I)$	h_0
1	6	0.2495	1.1
0.1	21	24.14	3.3

Für $k = 5$, $V = 10$ werden die Ergebnisse von diesem Wechsel der Anfangsbedingungen nur unwesentlich beeinflußt (Fig. 4.13). Bei $k = 1.25$, $V = 0.5$ macht sich

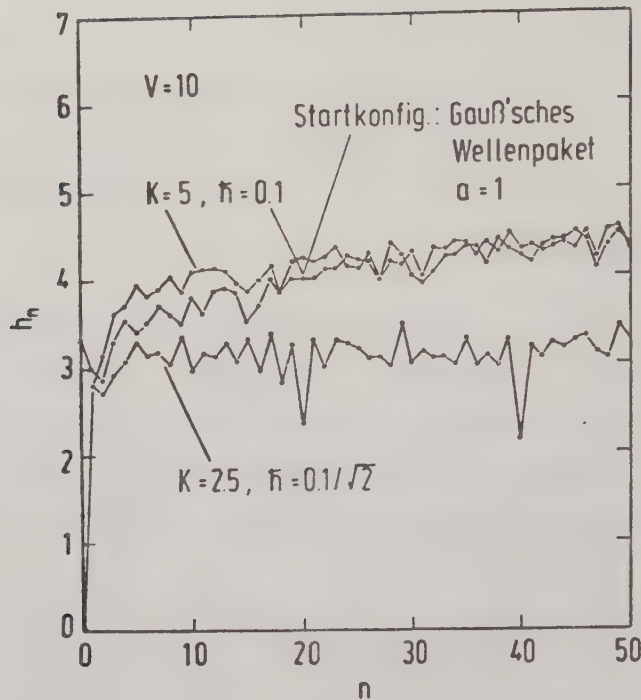


Fig. 4.13 Die Entropie als Funktion der Zeit; in allen Fällen ist $V = 10$. Gezeigt wird auch der Einfluß einer geänderten Startkonfiguration (Gauß'sches Wellenpaket) für $k = 5$.

nur bei $a = 0.1$ eine deutliche Abweichung bemerkbar: Nach dem ersten Kick ist Entropie praktisch konstant ($h_n \sim 3.25$). Dies läßt sich auf den hochangeregten Ausgangszustand zurückführen, an dem das periodisch einwirkende Potential (bei $\hbar = 1$) nicht mehr viel ändern kann. Bei $\hbar = 0.1$ ($V = 5$) fallen die Unterschiede zur Rechnung mit dem Grundzustand als Startkonfiguration wesentlich geringer aus, ebenso natürlich bei $a = 1$.

Das zweite Ziel bei der Simulation des klassischen Limes bestand darin, die in Kap. 4.4.1 erwähnten Mehrdeutigkeiten (gleiches k für verschiedene Paare von V und τ) zu beseitigen:

7. Zum einen haben wir die Masse des Pendels verdoppelt ($m = 2$) und den Wert $k = 5$ mit $V_0 T = 2$, $T/I = 2.5$ eingestellt. Im 'extremen' Quantenfall $\hbar = 1$ findet

man wieder einen fastperiodischen Verlauf (Fig. 4.14; die Struktur der ersten 30 Iterationen wiederholt sich in etwa), der sich aber deutlich von dem in Fig. 4.8 ($m = 1 : V_0 T = 1, T/I = 5$) unterscheidet. Dieser Unterschied verschwindet bei der Annäherung an den klassischen Limes insofern, als sich im System mit $m = 1$ ab $\hbar = 0.5$ dieselben Werte von V und τ erzielen lassen wie im Vergleichssystem mit $m = 2$ beim doppelten Wert von $\hbar$. Die in Fig. 4.8 dargestellten Ergebnisse für $\hbar = 1/\sqrt{10}, 0.1, 0.05$ sind also übertragbar auf das Vergleichssystem bei entsprechender Wahl von $\hbar = 2/\sqrt{10}, 0.2, 0.1$.

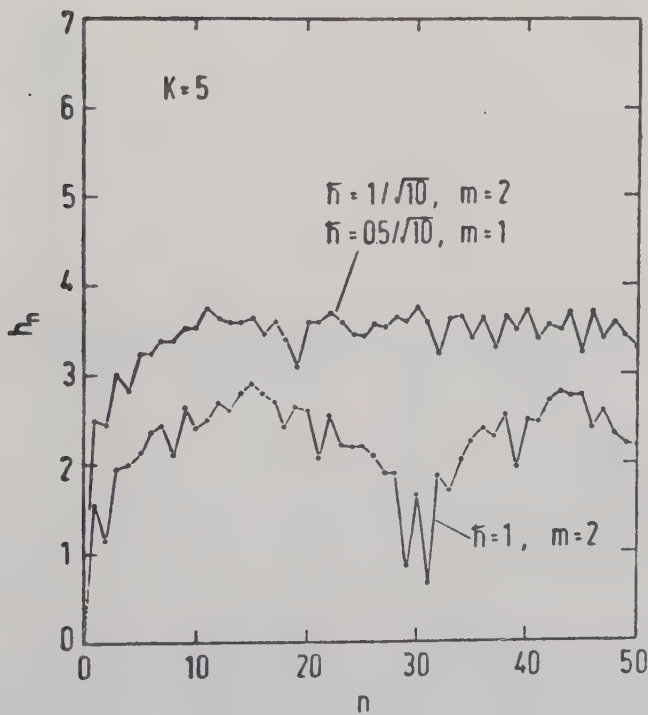


Fig. 4.14 Das Verhalten der Entropie bei Verdopplung der Masse ($m = 2$). Die obere Kurve gilt für beide Werte von m , falls $\hbar$ entsprechen eingestellt wird (s. Text).

8. Wird für $k = 10$ die Masse halbiert, erhält man $V_0 T = 0.5 \sqrt{2}, T/I = 10 \sqrt{2}$. Für $\hbar = 1$ ist $\tau = T/I = 10 \sqrt{2}$ größer als 4π . Das System zeigt daher dasselbe Verhalten

wie ein System mit dem reduzierten $\bar{\tau} = \tau - 4\pi$ und dem entsprechenden Wert $\bar{k} = 1.1142$: Für $\hbar < 4\pi/(10\sqrt{2})$ ist $\tau = \hbar T/I$ aber kleiner als 4π . Dann zeigen beide Systeme ein deutlich verschiedenes Verhalten (Fig. 4.15 und Fig. 4.16): Auch mit $T/I > 4\pi$ kann man den Wert $k = 10$ dem klassisch chaotischen Bereich zuordnen, wohingegen $\bar{k}$ dem regulären Bereich angehört.

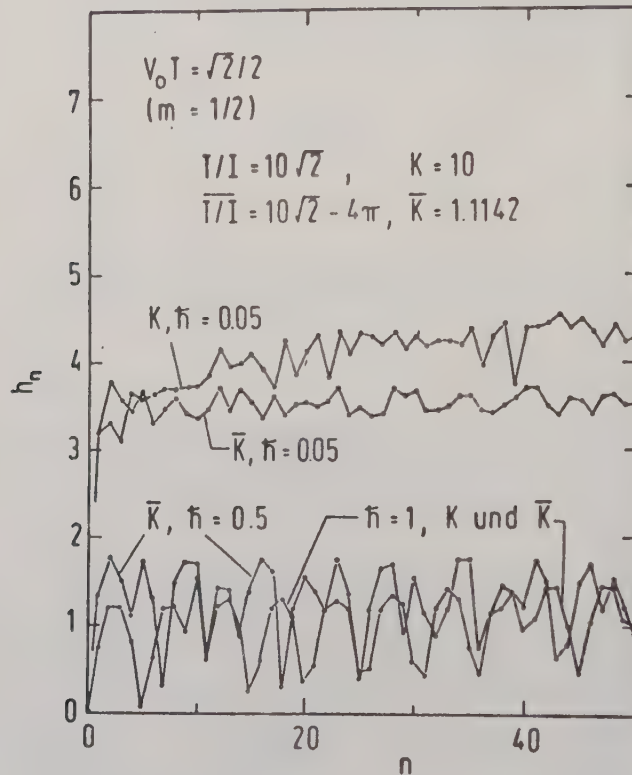


Fig. 4.15 Die Entropie als Funktion der Zeit. Die Pendelmasse wurde halbiert. Einer der quantenmechanischen Parameter kann deshalb die Werte T/I bzw. $\bar{T}/I$ annehmen. Unterschiede treten für $\hbar < 1$ auf (die Kurve für $k = 10, m = 0.5, \hbar = 0.5$ entspricht derjenigen für $k = 10, m = 1, \hbar = 1$ in Fig. 4.10 und ist hier nicht gezeigt).

Abschließend sollen unsere Ergebnisse zu der Frage nach Chaos in Quantensystemen zusammengefaßt werden: Im Kap. 4.4.3 haben wir gezeigt, daß beim Quantenrotator auch die Wahl spezieller kicking-Potentiale (nämlich solcher mit Sprüngen und Knicken) zu keinem diffusiven Verhalten der kinetischen Energie führt.

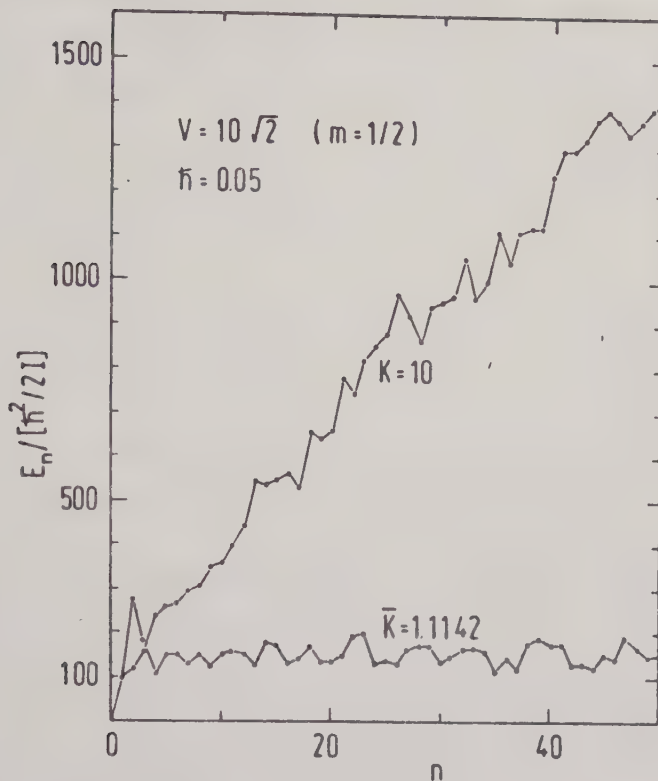


Fig. 4.16 Die Energie als Funktion der Zeit für $m = 0.5$. Sie zeigt für $\hbar < 1$ deutliche Unterschiede zwischen den Parameterwerten k und $\bar{k}$.

In Kap. 4.5.2 wurde untersucht, ob sich Aussagen über das Quasienergiespektrum des Quantenrotators mit Hilfe eines von Hannay und Berry (1980) eingeführten Modells gewinnen lassen. Die Darstellung des Rotators als Grenzfall dieser auf einem Torus quantisierten Dynamik erwies sich aber als nicht durchführbar. Im Kap. 4.6 schließlich haben wir eine Informationsentropie für Quantensysteme definiert und ihr Verhalten im Fall des Quantenrotators numerisch analysiert. Auch wenn man die eingeschränkte Aussagekraft exemplarischer numerischer Rechnungen berücksichtigt, so glauben wir doch die aufgeführten Resultate dahingehend interpretieren zu können, daß das Quantensystem sich an das klassische Chaos 'erinnert'. Darüber hinaus belegen sie, daß die von uns definierte Informationsentropie für Quantensysteme eine sinnvolle Größe ist,

da sie in ihrem Anfangsverhalten Unterschiede zwischen den möglichen klassischen Grenzfällen reflektiert. Sie zeigt einen deutlichen Anstieg für diejenigen Parameterwerte, die klassisches Chaos signalisieren, wohingegen sie direkt fast-periodisch verläuft, wenn das klassische System reguläres Verhalten aufweist.

LITERATURVERZEICHNIS

Ablowitz, M.J., Kaup, D.J., Newell, A.C., Segur, H. (1973)
Phys. Rev. Lett. 30, 1262

Abramowitz, M., Stegun, I.A. (1972)
"Handbook of Mathematical Functions",
Dover Publ., New York

Allroth, E., Mikeska, H.J. (1980)
J. Phys. C 13, L725

Benner, H. (1983)
private Mitteilung

Bronstein, I., Semendjajew, K. (1973)
"Taschenbuch der Mathematik",
Verlag Harri Deutsch, Frankfurt/Main

Büttiker, M., Landauer, R. (1980)
Phys. Rev. A 23, 1397

Büttiker, M., Landauer, R. (1982)
in: "Nonlinear Phenomena at Phase Transitions and
Instabilities", ed. by T. Riste,
Plenum Press, New York

Bullough, R.K., Caudrey, P.J. (eds.) (1980)
"Solitons",
Springer, Berlin

Casati, G., Chirikov, B.V., Israelev, F.M., Ford, J. (1979)
in: "Stochastic Behavior in Classical and Quantum Hamiltonian
Systems", eds. G. Casati, J. Ford,
Lecture Notes in Physics Vol. 93,
Springer, Berlin

Casati, G., Valz-Gris, F., Guarnieri, I. (1980)
Lett. Nuovo Cim. 28, 279

Casati, G., Guarnieri, I. (1983)
Phys. Rev. Lett. 50, 640

Chirikov, B.V. (1979)
Phys. Rep. 52, 263

Currie, J.F., Krumhansl, J.A., Bishop, A.R., Trullinger, S.E. (1979)
Phys. Rev. B 22, 477

Eilenberger, G. (1981)
"Solitons",
Springer, Berlin

Farmer, J.D. (1982a)
Physica 4D, 366

Farmer, J.D. (1982b)
Z. Naturforschung 37a, 1304

Fishman, S., Grempel, D.R., Prange, R.E. (1982)
Phys. Rev. Lett. 49, 509

Graham, R. (1982)
Bild der Wissenschaft 4/82, 68

Grempel, D.R., Fishman, S., Prange, R.E. (1982)
Phys. Rev. Lett. 49, 833

Hackenbracht, D., Schuster, H.G. (1981)
Z. Phys. B 42, 367

Hackenbracht, D., Schuster, H.G. (1983a)
Phys. Rev. B 27, 572

Hackenbracht, D., Schuster, H.G. (1983b)
Phys. Rev. B 27, 6916

Hackenbracht, D. (1982)
in: "Nonlinear Phenomena at Phase Transitions and Instabilities", ed. by T. Riste,
Plenum Press, New York

Halmos, P.R. (1977)
Amer. Math. Monthly 84, 714

Hannay, J.H., Berry, M.V. (1980)
Physica 1D, 267

- Helleman, R.H.G. (1983)
in: "Universality in Chaos", ed. by P. Cvitanović,
Adam Hilger Publ., Bristol
- Hogg, T., Huberman, B.A. (1982)
Phys. Rev. Lett. 48, 711
- Hogg, T., Huberman, B.A. (1983)
Phys. Rev. A 28, 22
- Israelev, F.M., Shepelyanskii, D.L. (1979)
Sov. Phys. Dokl. 24, 996
- Israelev, F.M., Shepelyanskii, D.L. (1980)
Theor. Math. Phys. 43, 417
- Kaup, D.J. (1975)
Stud. Appl. Math. L IV, 165
- Kjems, J.K., Steiner, M. (1978)
Phys. Rev. Lett. 41, 1137
- Kosloff, R., Rice, S.A. (1981)
J. Chem. Phys. 74, 1340
- Kumar, P. (1982)
Phys. Rev. B 25, 483
- Lamb, G.L. (1980)
"Elements of Soliton Theory",
John Wiley, New York
- Libchaber, A., Maurer, J. (1982)
in: "Nonlinear Phenomena at Phase Transitions and Instabilities", ed. by T. Riste,
Plenum Press, New York
- Liebmann, R., Schöbinger, M., Hackenbracht, D. (1983)
J. Phys. C 16, L633
- Loveluck, M., Schneider, T., Stoll, E., Jauslin, H.R. (1981)
Phys. Rev. Lett. 45, 1505

Magyari, E., Thomas, H. (1982)

Phys. Rev. B 25, 531

Magyari, E., Thomas, H. (1983a)

J. Phys. C 16, L535

Magyari, E., Thomas, H. (1983b)

private Mitteilung

Maki, M., Kumar, P. (1976)

Phys. Rev. B 14, 3920

McDonald, S.W., Kaufman, A.N. (1979)

Phys. Rev. Lett. 42, 1189

Mikeska, H.J., Patzak, E. (1977)

Z. Phys. B 26, 253

Mikeska, H.J. (1978)

J. Phys. C 11, L29

Pesin, Y.B. (1977)

Usp. Mat. Nauk 32 (4), 55; Math. Surveys 32 (4), 55

Reiter, G. (1981)

Phys. Rev. Lett. 46, 202

Richards, R.M. (1976)

in: "Local Properties of Phase Transitions",
Proceed. of the Intern. School of Physics "Enrico Fermi",
Course LIX, Varenna, eds. K.A. Miller, A. Rigamonti,
North-Holland, Amsterdam

Scalapino, D.J., Sears, M., Ferrell, R.A. (1972)

Phys. Rev. B 6, 3409

Schneider, T., Stoll, E. (1981)

Phys. Rev. B 23, 4631

Schöbinger, M. (1983a)

Phys. Rev. B 27, 3122

Schöbinger, M. (1983b)

Dissertation, Universität Frankfurt/Main

Schuster, H.G. (1983)

Phys. Rev. B 28, 381

Schuster, H.G. (1984)

"Introduction to Deterministic Chaos",
Physik Verlag, Weinheim

Sinai, Y.A. (1966)

Isz. Akad. Nauk SSR 30, 15

Steiner, M., Krüger, W., Babel, D. (1971)

Sol. State Comm. 9, 227

Steiner, M., Dorner, B. (1973)

Sol. State Comm. 12, 537

Steiner, M., Kjems, J.K. (1977)

J. Phys. C 10, 2665

Steiner, M. (1979)

J. Appl. Phys. 50, 7395

Steiner, M., Kakurai, K., Knop, W., Pynn, R., Kjems, J.K. (1982)

Sol. State Comm. 41, 329

Steiner, M. (1983)

Z. Phys. B 53, 117

Tjon, J., Wright, J. (1977)

Phys. Rev. B 15, 3470

Trullinger, S.E. (1980)

Phys. Rev. B 22, 418

Wysin, G., Bishop, A.R., Kumar, P. (1982)

J. Phys. C 15, L337

Zaslowski, G.M. (1981)

Phys. Rep. 80, 157

An dieser Stelle möchte ich Herrn Prof. Dr. H.G. Schuster für die Anregung zu dieser Arbeit danken sowie für sein beständiges Interesse an ihrem Fortgang, das in zahlreichen Diskussionen und vielen nützlichen Hinweisen zum Ausdruck gekommen ist.

Bei allen Mitgliedern des Instituts für Theoretische Physik der Universität Frankfurt/Main bedanke ich mich für die Zusammenarbeit, insbesondere natürlich bei Matthias Schöbinger, Rainer Liebmann, Klaus Horn und Bernhard Hoppe.

Bei Frau Hanna-Daoud möchte ich mich für das Schreiben des Manuskripts und bei Frau Boffo für das Anfertigen der Zeichnungen bedanken.

Der Studienstiftung des Deutschen Volkes sowie dem Sonderforschungsbereich 65, Frankfurt-Darmstadt, bin ich wegen der finanziellen Unterstützung zu Dank verpflichtet, ebenso der GSI, Darmstadt, wegen der zur Verfügung gestellten Rechenzeit auf ihrer Computeranlage.

L e b e n s l a u f

8.4.1953	geboren in Witten (Ruhr)
4/59 - 3/63	Volksschule in Duisburg und Jünkerath (Eifel)
4/63 - 9/64	Staatliches Gymnasium Gerolstein
10/64 - 5/71	Steinbart-Gymnasium Duisburg
26.5.1971	Abitur
7/71 - 6/73	Bundeswehr
WS 1973/74	Beginn des Physikstudiums an der Ruhr-Universität Bochum
3.10.1975	Vordiplom
30.4.1979	Diplom
5/79 - 10/79	wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut für Theoretische Physik III der Ruhr-Universität Bochum
11/79	wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut für Theoretische Physik der Johann Wolfgang Goethe-Universität Frankfurt/Main; Beginn der Dissertation bei Herrn Prof. Dr. H.G. Schuster

